

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

В.О.Москалюк, В.І. Тимофєєв

МОДЕЛЮВАННЯ ПРИЛАДІВ МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

*Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для аспірантів, які навчаються
за спеціальністю 153 «Мікро- та наносистемна техніка» та
освітньо-науковою програмою «Мікро- та наносистемна техніка»*

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2020

Рецензент : *Вербицький В.Г., д.т.н., професор кафедри мікроелектроніки КПІ ім. Ігоря Сікорського*

Відповідальний редактор *П.П.Лошицький, д.т.н., професор кафедри електронної інженерії КПІ ім. Ігоря Сікорського*

Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського (протокол № від XX.XX.2020 р.) за поданням Вченої ради факультету електроніки (протокол №XX/2020 від XX.XX.2020 р.)

Електронне мережне навчальне видання

*Москалюк Володимир Олександрович, канд. технічних наук, професор
Тимофєєв Володимир Іванович, доктор технічних наук, професор*

МОДЕЛЮВАННЯ ПРИЛАДІВ МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОНІКИ

«Моделювання приладів мікро- і наноелектроніки»: [Електронний ресурс]: підручник для аспірантів спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка», та освітньо-наукової програми «Мікро- та наносистемна техніка» / В.О. Москалюк, В.І.Тимофєєв; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 22,9 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020. –164 с.

Наведено текстовий та ілюстративний матеріал до лекцій з дисципліни «Моделювання приладів мікро- і наноелектроніки». Розглянуто фізико-хімічні особливості низькорозмірних структур. Викладено методи моделювання мікро- і наноприладів і багатопшарових наноструктур. Наведено приклади чисельного моделювання транзисторних структур з каналом на основі графену, з системами квантових ям і квантових точок. Розглянуто чисельну двовимірну модель гетеротранзистора з квантовими точками і квантовими ямами. Наведено математичну модель одноелектронного транзистора на основі молекули фенілдитіолу. Окремий розділ присвячено пасивним компонентам наноінтегральних схем, дипольним антенам на основі нанотрубок, а також застосуванню нанотрубок і нановолокон як ліній передачі та міжз'єднань у наносхемах.

© В.О.Москалюк, В.І.Тимофєєв; 2020

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2020

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	5
1. Фізичні основи мікро- і нанoeлектронних приладів.....	6
1.1. Квантово-розмірні структури.....	6
1.2. Особливості моделювання низькорозмірних систем.....	11
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>19</i>
2. Методи моделювання наносистем і багатошарових наноструктур.....	21
2.1. Квантові моделі переносу заряду	21
2.2. Метод хвильових функцій. Узагальнення методу ефективної маси.....	31
2.3. Граничні умови	33
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>36</i>
3. Фізичні властивості і моделювання процесів у квантових точках.....	37
3.1. Квантові точки як нульвимірні системи	37
3.2. Електронна підсистема квантових точок	40
3.3. Фононна підсистема квантових точок.....	45
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>53</i>
4 Моделювання транзисторів на основі графену	54
4.1. Графенові нанострічки, їх типи та властивості.....	54
4.2. Нанотранзистори на основі графену	56
4.3. Моделювання нанотранзистора на основі графена з горизонтальною структурою	61
4.4. Порівняльний аналіз моделей транзистора на основі графену.....	63
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>67</i>
5. Моделювання гетеротранзисторів з системами квантових ям і квантових точок.....	69
5.1. Структури гетеротранзисторів.....	69
5.2. Параметри структур гетеротранзисторів.....	72
5.3. Параметри квантових точок	75
5.4. Гетеротранзистор з квантовими точками.....	77
5.5. Чисельне моделювання гетеротранзисторів з квантовими точками...	78
5.6. Релаксаційні процеси у гетеротранзисторі з квантовими точками.....	87
5.7. Ефекти розмірного квантування в гетероструктурах з квантовими точками.....	93
5.8. Аналіз результатів моделювання гетероструктур з КТ.....	99
5.9. Частотні характеристики двоканальних гетеротранзисторів з квантовими точками.....	108
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>112</i>
6. Моделювання одoeлектронного транзистора (ОЕТ)	113
6.1. Фізичні процеси в ОЕТ.....	113
6.2. Аналіз моделей одoeлектронних транзисторів.....	118
6.3. Модель ОЕТ на основі молекули фенілдитіолу.....	121
6.4. Аналіз результатів моделювання ОЕТ.....	128
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>142</i>
7. Пасивні компоненти наноінтегральних схем: міжз'єднання, лінії	

передачі, конденсатори.....	143
7.1. Дипольні антени на основі нанотрубок.....	143
7.2. Застосування нанотрубок і нановолокон як ліній передачі та міжз'єднань у наносхемах	148
<i>Контрольні запитання та вправи</i>	<i>154</i>
РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА.....	155

ПЕРЕДМОВА

Сучасні тенденції розвитку мікро- і наноелектроніки характеризуються зростанням ступеня інтеграції мікро- і наносхем з метою підвищення їх швидкодії і робочих частот, що пов'язано з аналогічними вимогами до активних електронних компонентів, що входять до їх складу. Сучасною тенденцією є використання низькорозмірних систем і структур, включаючи квантові точки, нанотрубки, нанонитки, графенові стрічки тощо, які вимагають опису квантово-розмірних ефектів. Це обумовлює застосування нових методів і підходів до математичного моделювання фізичних процесів для формування цілісного уявлення про мікро- і наноприлади і фізичні закономірності та фізичні явища в них.

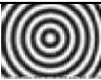
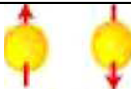
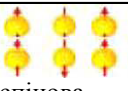
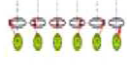
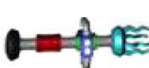
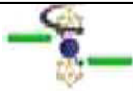

Виходячи з необхідності математичного опису фізичних процесів у різномірних низькорозмірних структурах до основних розділів посібника включено аналіз фізико-хімічних особливостей і квантових ефектів структур. Наведено методи моделювання мікро- і наноприладів, які використовують багатошарові наноструктури і гетеропереходи. Окрему увагу приділено методам чисельного моделювання польових транзисторних структур з каналом на основі графену, з системами квантових ям і квантових точок. Розглянуто підходи до чисельного двовимірного моделювання гетероструктурного транзистора із системами квантових точок і квантових ям. Розглянуто фізичні процеси і наведено математичну модель одноелектронного транзистора на основі молекули фенілдитіолу. Окремий розділ присвячено пасивним компонентам наноінтегральних схем, дипольним антенам на основі нанотрубок, а також застосуванню нанотрубок і нановолокон як ліній передачі та між'єднань у наносхемах. Концепція навчального посібника полягає у формуванні у читача цілісних теоретичних знань та практичних навичок щодо застосування математичних моделей мікро- і наноприладів, володіння методами їх моделювання і проектування, а також здатності використовувати засоби і технології проектування мікро- і наноприладів.

1. ФІЗИЧНІ ОСНОВИ МІКРО- І НАНОЕЛЕКТРОННИХ ПРИЛАДІВ

1.1. Квантово-розмірні структури

Характеристики частинок, молекул, їх сполук, а також різні механізми зміни їх станів представлені у таблиці 1.1. Інтерес представляє аналіз швидкісних властивостей (часів і енергій перемикавання), впливи шумів (термальної помилки і різного роду флуктуацій), щільність компоновки структур, потужності розсіювання, методи модуляції та ін.

Таблиця 1.1.

змінна	електрон	електронний спі́н			фізичні молекулярні зміни		
		 одиничний	 спінова моно область	 спінхвиля	 рух молекул	 обертання молекул	 фазові зміни
швидкість переключення	1 пс час релакс. енергії	1пс частота прецесії	10 пс, час релакс. спіну домена	10 пс, зовнішнє магнітне поле	0,1 пс, частота вібрації	0,1 пс, частота вібрації	1 нс, частота вібрації
енергія переключення	0,05 еВ 1 електрон	0,05 еВ 1 спі́н	0,05 еВ	0,03 еВ	0,8 еВ 521 атом	0,7 еВ 115 атом	3 еВ, 54 атом
ймовірність термальної помилки	0.6	0.6	0.6	0.75	0,0001	0,0001	0,0001
щільність комп. елем./ см ²	10 ¹⁴	10 ¹⁴	10 ¹¹	10 ⁹	10 ¹²	10 ¹²	10 ¹³
потужність розсіювання	мВт/см ²	мВт/см ²	кВт/см ²	Вт/см ²	мВт/см ²	мВт/см ²	100 кВт/см ²
масштабний фактор обмеження	темп. і квант. ефекти	темп. і квант. ефекти	надпара- магнітність	швидкість розпов- сюдження	стаб. молекул, розміри, збірка	стаб. молекул, розміри, збірка	розсіювання тепла
метод модуляції	ефект поля	магн. поле, спін- орбіт. взаємод.	магн. поле, спінорбіт. взаємод., магн.- електр. взаємод.	електр. притяж.	фотони, тепло, електрони	фотони, тепло, електрони	джоул. тепло
переважний матеріал	Si, A ³ B ⁵ і ін.	невідомо	ферромаг- нетики	ферромаг- нетики	ротаксан	метало- вуглеці	калгоніди

Відомо, що в електронних компонентах, які використовують ефект поля, обмежуючими чинниками є: скінченний час релаксації енергії (близько 1 пс), термальні ефекти і квантові ефекти. При цьому «порогова енергія» складає $3k_B T \ln 2$ (близько 0,05 еВ). До класу спітронних компонентів можуть бути віднесені структури, що використовують прецесію спину електрона, релаксаційні процеси монообласті спину або хвилі спінів, що виникають під впливом магнітного поля. У першому випадку час перемикання обмежується граничною частотою прецесії спину електрона, в другому – часом релаксації спину домену (близько 10 пс), а в останньому (до 10 пс) – максимальною частотою зміни магнітного поля. Третя група представлених у таблиці 1 можливих для реалізації компонентів використовує фізичні і молекулярні зміни – рух молекул (однією з перспективних представляється молекула ротаксана [1.1]), обертання молекул, фазові зміни в матеріалах. Швидкість перемикання у таких структурах обмежується частотою вібрації молекул, яка для першого і другого випадку складає близько 0,1 пс, а для випадку фазових змін – 0,1 нс.

Оскільки фізичні розміри молекул істотно більше електронних і спітронних структур потрібні значні енергетичні витрати («енергія перемикання» зростає на порядки), пов'язані з модуляцією характеристик молекулярних структур, у такому разі, проте, можливе отримання більш потужних компонентів. Слід також відзначити, що ймовірність термальної помилки у таких компонентах на декілька порядків менше, ніж у електронних і спітронних структурах. Існують фізичні чинники масштабних обмежень для наноструктур з різними механізмами модуляції характеристик. Для електронних структур і структур з «одиначним електронним спіном» це температурні і квантові ефекти, для структур з монообластю спину і спінхвилями – це прояв ефекту надпарамагнетизму і обмеження швидкості розповсюдження хвиль спінів. Для молекулярних структур це проблеми стабільності молекул і збірки (технології отримання структур з повторюваними характеристиками), а для структур, що використовують фазові зміни, – проблема відведення тепла. Технологічною проблемою є також проблема компоновки і збирання нанокомпонентів інтегральних схем з істотно різними властивостями – це можуть бути напівпровідники і вуглецеві матеріали (фулерени), феромагнетики, молекули органічних і неорганічних сполук, металовуглеці, калгоніди і ін. У роботі [1.2] наводяться результати експериментальних досліджень контакту «органічна молекула-металева поверхня». Як передбачається, має місце хімічний механізм взаємодії між молекулою і металевим електродом, пов'язаний зі зміною електронної

щільності і появою молекулярного електростатичного потенціалу. Розглядається система з двох зв'язаних атомів вуглецю, сполучених з кільцями фенілу. Під час взаємодії відбуваються зміни в геометрії молекули, що характерно для хімічно зв'язаних елементів, які можуть відбуватися на відстані близько 1 нм. Розглянуті моделі процесів припускають утворення квантово-механічних кластерів біля поверхні металевого електроду. У такому разі вважається, що хвильові функції атомів металу локалізуються, тобто взаємодія певного шару металу не змінює хвильові функції сусідніх шарів металевого електроду.

Модуляція провідності контакту «метал-молекула» відбувається за зміни електричного зміщення на металевій поверхні, що призводить до зміни довжини зв'язків і перенесення електронів унаслідок тунелювання.

Використовуючи методи «зонної інженерії», можна конструювати квантово-розмірні структури із заданим електронним спектром і необхідними оптичними, електричними і іншими властивостями.

Квантові ями. Цим терміном позначаються системи, в яких є розмірне квантування руху носіїв заряду хоча б в одному з напрямів. Спочатку основні дослідження квантових ям проводилися на інверсійних каналах кремнієвих МДН-транзисторів, пізніше і до теперішнього часу широко досліджуються властивості квантових ям в гетероструктурах. Основні фізичні явища в квантових ямах: розмірне квантування електронного спектру, квантовий ефект Холла (цілочисельний і дрібночисельний), дуже висока рухливість електронів. Основні методи отримання квантових ям на гетероструктурах: металоорганічна газова епітаксія і молекулярно-пучкова епітаксія.

Приладові застосування: високочастотні польові транзистори з високою рухливістю електронів, напівпровідникові гетеролазери і світлодіоди від ближнього інфрачервоного до блакитного світла, лазери дальнього інфрачервоного діапазону, параметричні джерела світла середнього інфрачервоного діапазону, фотоприймачі середнього інфрачервоного діапазону, домішкові фотоприймачі дальнього інфрачервоного діапазону, приймачі дальнього інфрачервоного діапазону на квантовому ефекті Холла, модулятори в ближньому інфрачервоному діапазоні.

Квантові нитки — це системи, в яких рух носіїв заряду квантований у двох напрямках. Перші квантові нитки виготовлялися на основі квантових ям за допомогою створення потенціального рельєфу за допомогою двох затворів, розташованих над квантовою ямою. Основні фізичні явища в квантових нитках: квантування провідності, сильно корельований

електронний транспорт. Основні методи отримання квантових ниток ті ж, що і квантових ям, плюс використання прецизійного травлення або спеціальних затворів.

Квантові точки — нанооб'єкти, в яких рух носіїв заряду квантований у всіх трьох напрямках. Мають дискретний енергетичний спектр (штучний атом). Основні фізичні явища в квантових точках: одноелектронні і одnofотонні явища. Методи отримання ті ж, що і для квантових ям, проте декілька інших режимів, якщо відбувається спонтанне зростання квантових точок по механізму Страньски—Крастанова. Або використання прецизійної літографії для створення квантових точок з квантових ям.

Приладові застосування: лазери і світлодіоди в ближньому інфрачервоному діапазоні, фотоприймачі для середнього інфрачервоного діапазону, одnofотонні приймачі, одnofотонні генератори, одноелектронні транзистори.

Напівпровідникові ниткоподібні нанокристали – перпендикулярні до поверхні підкладки ниткоподібні нанокристали (рис.1.1).

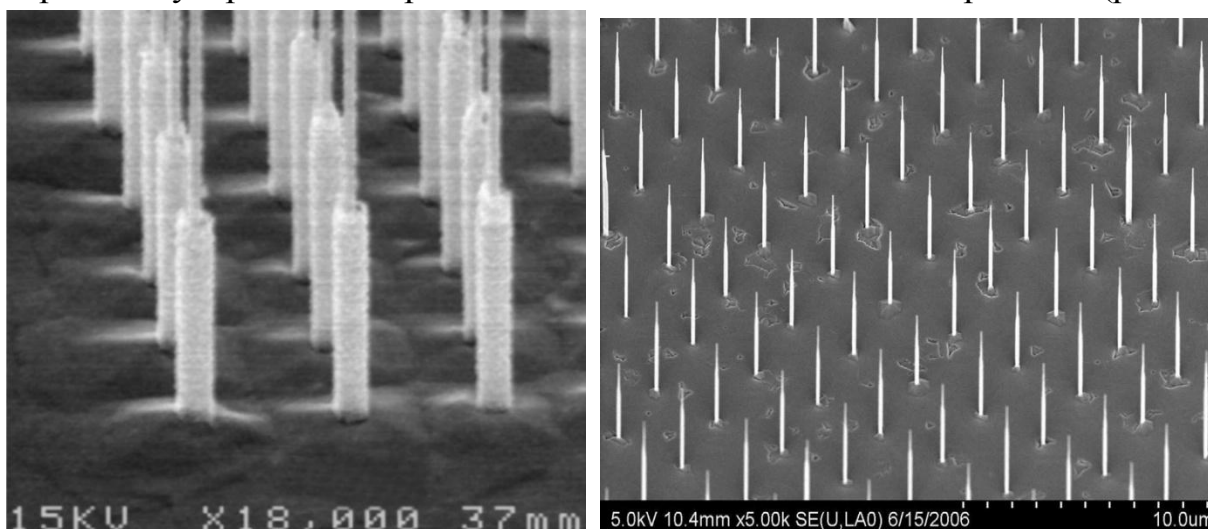


Рис. 1.1. Приклади матриць ниткоподібних нанокристалів

Структури з тунельно-прозорими бар'єрами (системи квантових ям і надгратки). Основні фізичні явища в таких системах: резонансне тунелювання; формування мінізонного спектру в надгратках — періодичних системах, квантових ямах, що містять багато розділених тунельно-прозорих бар'єрів; нелінійні електричні і оптичні ефекти в надгратках. Методи вирощування цих структур ті ж, що і для квантових ям.

Приладові застосування: резонансно-тунельні діоди (генератори і змішувачі у гігагерцовому і терагерцовому діапазонах); потужні генератори і змішувачі на надгратках: каскадні лазери середнього і дальнього інфрачервоного діапазону.

Фотонні кристали — системи, яким властивий зонний спектр для фотонів. Основні фізичні явища: відсутність пропускання (повне віддзеркалення) світла в певному діапазоні частот, резонансні фотонні стани. Можливі приладові застосування: ефективні лазери з низькими пороговими струмами, системи управління світловими потоками.

Таблиця 1.2. Наноструктури і наноматеріали

Наноструктура	Характерний розмір	Матеріал
Кластери, квантові точки, нанокристали	Радіус, 1-10 нм	Ізолятори, напівпровідники, метали, магнітні матеріали
Інші наночастинки	Радіус, 1-100 нм	Керамічні оксиди, високотемпературні надпровідники
Нанобіоматеріали	Радіус, 1-10 нм	Протеїнові мембрани
Нановуси	Діаметр, 1-100 нм	Напівпровідники, метали, оксиди, нітриди, алмазні вуса
Нанотрубки	Діаметр, 1-100 нм	Вуглець, шарові оксиди і халькогеніди, нітриди бора і галія
Нанобіострижні	Діаметр, 5-10 нм	ДНК, РНК
Двовимірні наночастинки	Області, нм^2 - мкм^2	Напівпровідники, метали, магнітні матеріали
Поверхневі і тонкі плівки	Товщина, 1-100 нм	Напівпровідники, метали, ізолятори, ДНК, мембрани
Тривимірні надгратки наночастинок	Кілька нм по трьох вимірах	Напівпровідники, метали, магнітні матеріали

Серед матеріалів можна виділити декілька основних різновидів: **консолідовані наноматеріали, наноімпровізовані, нанополімери, нанобіоматеріали, фулерени і тубулярні наноструктури, каталізатори, нанопористі матеріали і супрамолекулярні структури**. Існують і їх гібриди, наприклад, металополімерні або біополімерні нанокомпозити.

До **консолідованих наноматеріалів** відносяться компакти, плівки і покриття з металів, сплавів і сполук, отримані методами порошкової технології, інтенсивної пластичної деформації, контрольованої кристалізації з аморфного стану і різноманітними прийомами нанесення плівок і покриттів.

Нанозерна (нанокристали) цих матеріалів знаходяться не в ізольованому (тобто у вигляді окремих утворень) або слабозв'язаному (наприклад, наночастинки із захисними полімерними оболонками) вигляді, а в консолідованому стані. Міцність межзеренних прошарків в консолідованих наноматеріалах досить висока.

Нанонапівпровідники, нанополімери і нанобіоматеріали можуть бути як в ізольованому, так і частково в консолідованому стані, утворюючи також гібридні (змішані) матеріали.

1.2. Особливості моделювання низькорозмірних систем

Моделювання наносистем — це новий етап у розвитку обчислювальних методів [1.3-1.5].

Розміри наносистем на порядки більші, ніж розміри звичайних молекулярних систем, як правило це тисячі або навіть десятки тисяч атомів. У той же час наночастинки не мають тривимірної періодичності, як, наприклад, кристали. Трансляційна симетрія, яку мають кристали, дозволяє обмежуватися явним урахуванням тільки атомів одного елементарного об'єму, забезпечуючи таким чином саму можливість виконання квантово-механічних розрахунків кристалів. Розвиток суперкомп'ютерних технологій здатний забезпечити квантове моделювання наносистем, і як наслідок, привести до створення необхідної теоретичної бази для розвитку нанотехнологій. Питання будови атома і атомних з'єднань стає ще актуальнішим [1.3]. **Принцип атомізму** є основоположним принципом атомістичного світогляду і сучасного природознавства.

Перший крок в емпіричному розумінні внутрішньої будови атома був зроблений, коли була встановлена складна електрон-протон-нейтронна структура атома. Дана обставина надала імпульс для початку теоретичних пошуків несуперечливої моделі атома. Найбільш прийнятною структурною моделлю на той момент з'явилася оболонкова модель Н.Бора (1920 р.). Потім у прагненні дати пояснення незбагненно високій стійкості атомів, а також з метою опису атомних спектрів була створена квантова механіка (в першу чергу зусиллями Л. де-Бройля, Е.Шредінгера, В.Гейзенберга), яка в подальшому стала основою атомної фізики. Основним досягненням квантової механіки стала квантова теорія атома водню (1926 р.), яка дозволила з високою точністю погоджувати дані, що розраховувалися, з експериментальними. У прагненні перенести отриманий результат на багатоелектронні атоми була розроблена «воднеподібна» теорія Хартри-

Фока (1930 р.), заснована на розв'язанні рівняння Шредінгера у наближенні самоузгодженого поля. Одним з радикальних висновків даної теорії є те, що атом є безформним, таким, що не має структури, електронної хмари. В результаті цього питання про структуру атома на довгі часи було «відкладене». Сьогодні приходить усвідомлення необхідності оцінки можливостей квантовомеханічного опису багатоелектронних атомів. В першу чергу стала очевидною неспроможність прийнятого в теорії Хартри-Фока **наближення самоузгодженого поля**. Ідея самоузгодженого (усередненого) внутріатомного поля знаходиться в явній суперечності з періодичним характером даних експерименту по потенціалах іонізації атомів і багатозарядових іонів. **Внутріатомні поля сильно неоднорідні, завдяки оболонковій будові атомів; електричні поля зовнішніх і внутрішніх оболонок можуть розрізнятися в десятки і сотні тисяч разів.** Концепція самоузгодженого поля не витримує критики і в теоретичному відношенні; вона протиричить відомій і всебічно апробованій теоремі Гауса про розподіл зарядів усередині замкнутих оболонок. Стає все більш очевидною необхідність в нових альтернативних підходах до опису атомів.

На теперішній час відомий ряд моделей атомів і альтернативних теорій, що претендують на створення неокласичної атомної фізики. При всьому різноманітті моделей електронної будови атомів в їх основі лежить основоположна і всебічно апробована оболонкова модель, в початковому варіанті запропонована Н. Бором. Проте ні модель Н.Бора, ні подальші оболонкові моделі не дають кількісного опису атомів, не розкривають електронну структуру атомів і не пояснюють механізм формування електронних оболонок. Важливий крок в удосконаленні оболонкової моделі атомів був зроблений у зв'язку з обґрунтуванням нових величин - **поляризаційного радіусу a_n і енергії зв'язку \mathcal{E} зовнішніх електронів атома з його ядром (остовом),** що мають статус атомних констант. Вони мають емпіричне походження і засновані на вимірюванні ступеня поляризації α атомів. У загальному випадку радіус атома складається з радіусу остову атома $a_{ост.}$ і відстані d_n між зовнішніми електронами і остовом атома, так що $a_n = d_n + a_{ост.}$, причому, як правило, $a_{ост.} \ll d_n$. У свою чергу радіус остову атома складається з внутрішніх міжоболонкових відстаней. Ефективна відстань безпосередньо пов'язана з поляризацією атома співвідношенням $\alpha = kd_n^3$, де k – коефіцієнт, що дорівнює $\frac{1}{2}$ для атомів

першої групи таблиці Менделєєва і одиниці для решти атомів. Величини d_n і E взаємозв'язані універсальним співвідношенням $\mathcal{E} = -\frac{e^2}{d_n}$.

Нові дані по радіусах і енергіях зв'язку атомів вивели побудову моделі атома на якісно новий рівень – на рівень їх кількісного опису. Була запропонована несуперечлива **диполь-оболонкова модель**, в якій утворення оболонки атома зобов'язане позитивному заряду остову атома, що діє як аттрактор для валентних електронів, на зразок ядра атома водню. У даній моделі багаточастинковий (багатоелектронний) підхід вдалося звести до двочастинкового (двозарядового) підходу, у якому атом є системою, що складається з позитивно зарядженого остову із зарядом $+eN_n$ (N_n – число електронів на зовнішній n -оболонці) і заряду зовнішньої оболонки як сукупності взаємозв'язаних між собою N_n електронів. Таке зведення досягається застосуванням теореми Гауса, згідно якої заряд на поверхні сфери рівний сумі всіх позитивних і негативних зарядів усередині сфери, а результуючий заряд на даній сфері еквівалентний точковому заряду, поміщеному в центр сфери.

Введення в модель атома **радіусу і енергії зв'язку**, що мають статус атомних констант, закріплює уявлення, що склалися, про атом як індивідуальної будівельної одиниці і забезпечує тим самим можливість кількісного опису зв'язку мікро- і макроскопічного рівнів. Таким чином, сьогоденні уявлення про атом як про мікрооб'єкт із строго встановленою внутрішньою електронною структурою відображають два основоположні чинники: 1) власно атомістичний (що характеризує індивідуальність і самототожність атомів) і 2) еволюційний, який виконує структуротворну роль в процесі хімічної еволюції речовини. Дана обставина представляється вирішальною у постановці робіт в області нанопроєктування і наноконструювання.

Для опису **геометричних розмірів** атома використовується близько десятка різного роду **атомних радіусів, таких як ван-дер-ваальсові, орбітальні, кінетичні, ковалентні і ін.** Проте жоден з перерахованих радіусів за своїм змістом не є радіусом атома. В даний час у науковий ужиток введено поняття «поляризаційного радіусу», якому дано обґрунтування як атомної константи. Поляризаційний радіус a_n атома визначається на підставі внутрішнього властивого зв'язку його з ступенем поляризації. В даний час отримані дані по поляризаційних радіусах для більшості атомів таблиці Менделєєва. Визначеність розмірів атомів дозволила внести визначеність і відносно геометричних розмірів молекул.

Дійсно, геометрія молекул характеризується а) між'ядерними відстанями l_n (довжинами зв'язку), б) кутами між зв'язками і в) розмірами зовнішніх електронних оболонок атомів, що формують зовнішній контур молекули. Довжини зв'язку і кути між зв'язками молекул відомі з експерименту з достатньо високою точністю. Дані по радіусах зовнішніх атомів молекули можуть бути визначені на підставі даних по поляризаційних радіусах. Отже проблема визначення габаритних розмірів атомних утворень у першому наближенні може вважатися вирішеною.

Для кількісного опису *міцності атомів* використовуються енергія зв'язку \mathcal{E} валентних електронів з ядром атомів і потенціал іонізації I . Останній є енергією, необхідною для відриву від атома валентного електрона. Інструментальна погрішність вимірювання потенціалів іонізації достатньо висока (до 0,1 еВ і краще). Проте потенціалам іонізації I властива систематична погрішність, обумовлена перебудовою електронної оболонки в результаті видалення електрона з даної оболонки, яка може досягати одиниць еВ. Енергія зв'язку \mathcal{E} в процесі вимірювання залишається незмінною, і вимірювальна процедура обурює стан атома трохи. Дану обставину необхідно враховувати при оцінці міцності атомів. Самі величини енергій атомів знаходяться в межах (3 – 25) еВ. Для опису енергетики молекул окрім енергії зв'язку \mathcal{E} необхідно мати в своєму розпорядженні додатковий параметр – *енергію дисоціації* D , яка характеризує енергію зв'язку (зчеплення) атомів один з одним. Методи вимірювання енергії зв'язку атомів відпрацьовані і дозволяють виконувати вимірювання D з достатньо високою точністю (до сотих долей еВ). Стійкість молекул і конструктивні особливості молекулярних систем у першу чергу визначаються саме енергією дисоціації D . Чисельні значення енергій D знаходяться в межах (1-10) еВ. Дані вимірювань потенціалів іонізації атомів і енергії дисоціації молекул систематизовані і наведені у відповідних довідниках, і вони можуть бути використані з метою проведення інженерних розрахунків міцності наносистем. Операція приєднання-від'єднання атомів (молекул) належить до основних технологічних прийомів гіпотетичного нановиробництва. Зрозуміло, що вона цілком визначається енергією взаємодії між мікросистемами в області контакту. При цьому якість «зварки» (зчеплення) атомів цілком і повністю визначається геометрією і властивостями (ступенем поляризації і стійкістю) самих атомів.

Точний математичний розрахунок конфігурації нанодинамічних систем необхідний через особливості використовуваної технології виробництва. Нанотехнолог не може безпосередньо ручним або апаратним способом

впливати на початкову структуру або конформацію молекули, і в ідеалі його функції повинні зводитися до того, щоб всього лише створити умови, за яких молекула або група молекул самостійно збереться в необхідну структурну конфігурацію. У цьому полягає особливість процесів проектування будь-яких нанопристроїв, у тому числі і пристроїв наноелектроніки. **Молекула (наносистема) зможе зібратися в необхідну конформацію тільки в тому випадку, якщо дана конформація буде найбільш енергетично вигідною в порівнянні зі всіма іншими можливими конформаціями.** Ця найбільш енергетично вигідна конформація може бути розрахована математично.

Тому така найбільш загальна постановка задачі дозволяє займатися розробкою, математичним розрахунком і уніфікацією базових стандартних наномодулів, на основі яких згодом можна буде проектувати багато всіляких систем, зокрема це можуть бути молекулярні комп'ютери, осередки нанопам'яті, нанотранзистори, нанодатчики, системи доставки ліків, нанодвигуни, наноманіпулятори і тому подібне. Під час **побудови математичних моделей молекул слід враховувати, що молекула сама по собі є динамічною системою і знаходиться в стані постійного коливального руху.** Частоти власних молекулярних коливань проявляються в смугах резонансного поглинання молекулярних спектрів. Відповідно, при зміні конформації молекул спектри також зазнають зміни. Вимірюючи спектр наносистеми до і після дії, що управляє, ми зможемо визначити, в якому стані вона знаходиться. Спектри поглинання крупних молекул можуть зазнавати істотних змін у декількох випадках. Перш за все, це відбувається при приєднанні або від'єднанні крупних атомних груп, або фізичних операторів, в ході фазових змін, а також при встановленні або розриві внутрішніх молекулярних або міжмолекулярних хімічних зв'язків, включаючи водневі і ван-дер-ваальсові зв'язки. Крім того, невелика зміна в спектрах поглинання відбувається під час значних змін конформації молекул.

Стосовно нанорозмірних систем підхід на основі моделювання має принципові труднощі. **У таких системах відсутній дальній порядок, властивий кристалам і який дозволяє зменшити число незалежних ступенів свободи системи.** З іншого боку, ближній порядок, характерний для рідин, не дозволяє визначити всі функціональні властивості таких матеріалів. Слід враховувати також технічні труднощі, пов'язані з моделюванням на атомному рівні макрооб'єктів. Так, у кубі речовини зі стороною 100 нм міститься приблизно 10^7 атомів. Пряме моделювання таких систем у наближенні молекулярної динаміки і, тим більше, квантової механіки скрутно навіть з використанням сучасної суперкомп'ютерної техніки.

У зв'язку з цим представляється необхідним використання ієрархічного багатомасштабного підходу. При цьому на кожному нижньому рівні обчислюються параметри і змінні, необхідні для побудови моделей верхнього рівня. Цілі, які досягаються на верхньому рівні ієрархічного моделювання, тим самим визначають задачі моделювання на нижніх рівнях. Таким чином, шикується узгоджена ієрархія моделей, направлена на “наскрізне” моделювання систем від рівня конструкції і поведінки кінцевого виробу аж до атомно-молекулярного рівня. Слід зазначити, що прикладне і промислове значення має саме такий “наскрізний” підхід, що дозволяє понизити витрати на проведення чисельних експериментальних досліджень.

Пропонована ієрархічна система моделювання на базі відомих і доступних пакетів, що допускають паралельну обчислювальну реалізацію, вельми актуальна і може бути реалізована з використанням кластерних високопродуктивних мультипроцесорних обчислювальних систем. У такому разі верхній рівень визначає задачі моделювання на нижньому рівні, а використовувані моделі утворюють ієрархію ухвалення рішень.

Моделювання на квантово-механічному рівні здійснюється для малих кластерів з числом атомів 10-100, що визначають існування можливих в матеріалі фаз. Опис модельованого об'єкту будується на мові хвильових функцій і заданого гамільтоніана системи (ізолюваний кластер). **Цільовими функціями є електронний енергетичний спектр, власні функції і щільність станів ізолюваного кластера за фіксованого положення ядер, потенціальна енергія системи з урахуванням електронно-ядерних підсистем.**

На квантово-статистичному рівні використовуються моделі, що враховують оточення кластерів. Кластер описується статистичним оператором, усередненим по змінним його оточення. На кінетичному рівні досліджується еволюція квантових нерівноважних систем, які складаються з сотень кластерів, в нестационарних зовнішніх полях. **Як альтернатива кінетичному рівню використовуються методи молекулярної динаміки для атомів, що розглядаються як класичні частинки.** На основі класичних рівнянь молекулярної динаміки стає можливим розглядати системи, що налічують 1000 і більш атомів (до 1 млн.) залежно від продуктивності використовуваних обчислювальних систем. Таким чином можна описати об'єкти розміром 100-1000 нм³, а також промодельовати роботу пристроїв молекулярних розмірів.

Для опису великих за об'ємом систем потрібно проводити усереднювання характеристик матеріалу за об'ємом елементу наступного (мезоскопічного) рівня і приписувати цьому елементу

отримані усереднені характеристики. Слід зазначити, що на цьому рівні важливі не тільки середні значення фізичних величин, але і їх флуктуації. **Врахування флуктуацій є найбільш істотною відмінністю мезофізики від рівня макрофізики,** на якому достатньо обмежитися феноменологічною динамікою середніх значень величин. На мезоскопічному рівні моделювання використовуються рівняння балансу маси, енергії, імпульсу, моменту імпульсу, ентропії, макроскопічні рівняння Максвела разом зі своїми граничними умовами – сукупність рівнянь суцільного середовища з джерелами дрібномасштабних і великомасштабних флуктуацій. Для деяких систем можливо включати визначення змінних мезоскопічного рівня до моделей молекулярно-динамічного рівня.

Результати **мезоскопічної моделі** застосовуються для визначення параметрів методу скінченних елементів, що реалізовує моделі суцільного середовища і моделі рівня конструкцій, які базуються на теорії механізмів і машин і теорії систем. Конструкційний рівень у міру розвитку нанотехніки і технології опускається за ієрархією масштабів аж до квантових рівнів і, отже, елементи кожного рівня ієрархії можуть бути не тільки тими чи іншими фізичними системами або кластерами матеріалу, але й бути конструкціями, тобто логіко-динамічними системами.

Розроблена велика кількість комп'ютерних програм, орієнтованих на різні апаратні платформи, для квантово-механічного і молекулярно-динамічного моделювання атомно-молекулярних систем, зокрема програмні пакети Molecular Studio фірми Accelrys, HyperChem фірми Hypercube, Chem Office Кембріджського університету, TINKER Вашингтонського університету, GAMESS університету штату Айова і PC GAMESS МДУ та інші, розраховані, в основному, на персональні комп'ютери і які не мають вбудованих засобів розпаралелювання; системи NWChem Північно-західної тихоокеанської національної лабораторії Міністерства енергетики США і VASP Віденського університету, Австрія, які можуть бути реалізовані на паралельних комп'ютерах; програмні засоби, які реалізують метод скінченних елементів (ANSYS, LS-DYNA і ін.) і мають засоби розпаралелювання. Вказані пакети дозволяють розраховувати квантово-механічні системи, які містять до декількох тисяч електронів, і молекулярно-динамічні системи, які налічують мільйони атомів, на проміжках часу до наносекунд. У розрахунках можуть використовуватися сітки, що містять десятки мільйонів вузлів.

Існуюча класифікація напівкласичних моделей наносистем може бути систематизована так, як представлено на рис. 1.2.

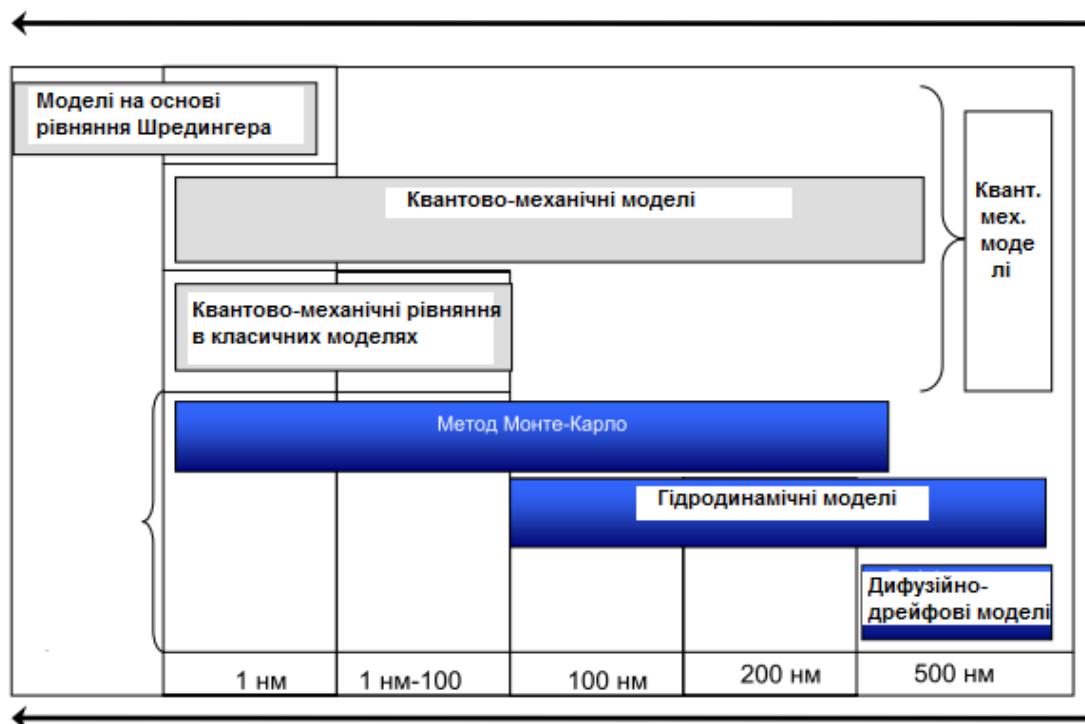


Рис. 1.2. Класифікація напівкласичних і квантово-механічних моделей

Дифузійно-дрейфові моделі широко використовуються для моделювання пристроїв з лінійними розмірами **не менше 0,5 мкм**. Вони вимагають мінімальних обчислювальних витрат у порівнянні з іншими класами моделей наносистем. Проте обмеженість цих моделей, пов'язана з припущенням про лінійну локальну залежність між швидкістю дрейфу та напруженістю поля, приводить до необхідності застосування більш точних моделей. **Гідродинамічні моделі можуть використовуватися для моделювання пристроїв з лінійними розмірами не менше 0,1 мкм**. Вони займають проміжне місце в групі напівкласичних моделей, забезпечуючи компроміс між обчислювальними витратами і точністю в порівнянні з рештою моделей, що входять до групи напівкласичних моделей. Проте апроксимації, прийняті в цих моделях, не дозволяють коректно описати властивості наноструктур.

У зв'язку з цим перспективним представляється **метод Монте-Карло**. Для спрощення розрахунків використовуються ряд наближень, зокрема, **метод класичної молекулярної динаміки**. Цей підхід був успішно застосований для опису наноструктур з лінійними розмірами **понад 1 нм**. До недоліків цього підходу слід віднести значну трудомісткість моделювання порівняно з рештою моделей, що входять до групи напівкласичних моделей.

У даний час існує різне програмне забезпечення, що дозволяє виконати моделювання із застосуванням напівкласичних моделей. Не

зважаючи на переваги напівкласичних моделей, при описі наноструктур з лінійними розмірами порядку нанометрів необхідно використовувати моделі, засновані на принципах квантової механіки.

З погляду забезпечення коректності моделювання наносистем якнайкращими є моделі, що базуються на використанні **рівняння Шредінгера**. Проте дуже велике число змінних, що приводить до значних обчислювальних витрат, стримують застосування цього підходу в наноінженерії.

Проте, майже єдиним підходом для моделювання наноструктур з лінійними розмірами менше 1 нм є застосування моделей на основі рівняння Шредінгера.

На основі **квантово-кінетичних моделей** (квантово-механічної версії рівняння Ліувіля, кінетичного рівняння Больцмана) можна отримати більш прості підходи порівняно з моделями на основі рівняння Шредінгера. До їх переваг слід віднести також достатньо великий діапазон лінійних розмірів наноструктур, для яких квантово-кінетичні підходи ще коректні. Проте їх точність є припустимою тільки для моделювання розріджених систем.

У даний час існує різноманітне програмне забезпечення, що дозволяє виконувати розрахунки за допомогою моделей, заснованих на законах квантової механіки. Одним з чинників, які стримують застосування моделей на основі рівняння Шредінгера у загальному випадку є великі обчислювальні витрати.

Контрольні запитання та вправи

- 1.1. У чому полягає головна особливість електронних процесів у низькорозмірних напівпровідникових структурах?
- 1.2. Якими рівняннями описуються процеси у наноструктурах з ідеальною періодичною кристалічною ґраткою? Які практичні висновки з цього виходять?
- 1.3. У чому полягають особливості електронних процесів у двовимірних низькорозмірних напівпровідникових структурах?
- 1.4. У чому полягають особливості електронних процесів у одновимірних низькорозмірних напівпровідникових структурах?
- 1.5. У чому полягають особливості електронних процесів у нульвимірних низькорозмірних напівпровідникових структурах?

- 1.6. Наведіть приклади дво-, одно- і нульвимірних наносистем.
- 1.7. У чому полягає суть методів моделювання і як вони пов'язані з характерними розмірами напівпровідникових структур?
- 1.8. У чому полягає різниця фізичних процесів в електронних, спінтронних і молекулярних структурах?
- 1.9. У чому полягають особливості моделювання низькорозмірних систем?
- 1.10. Сформулюйте головну особливість електронних станів у низькорозмірних структурах.
- 1.11. Проведіть порівняльний аналіз енергетичних і швидкісних властивостей електронних, спінтронних і молекулярних структур.
- 1.12. Яка фізична природа процесів на границях потенціальних бар'єрів і потенціальних ям?

2. МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОСИСТЕМ І БАГАТОШАРОВИХ НАНОСТРУКТУР

2.1. Квантові моделі переносу заряду

Моделі традиційних електронних компонентів належать переважно до класу дрейфово-дифузійних. З їх використанням можна достатньо точно розраховувати характеристики пристроїв традиційної мікроелектроніки. Однак основні рівняння цих моделей базуються на припущенні, що характерні розміри компонентів значно перевищують довжину вільного пробігу носіїв заряду. Якщо ж це не виконується, то самі поняття дрейфу та дифузії втрачають смисл, використання моделей стає мало обґрунтованим, а їх результати не завжди узгоджуються з експериментальними даними.

Усі поняття, що використовуються у дрейфово-дифузійних моделях, мають інтуїтивно зрозумілий фізичний смисл, адже у рамках вказаних моделей всі хвильові властивості електрона враховано ефективно: взаємодію з періодичним полем кристалу враховано у ефективній масі та зонній структурі; наявність напівцілого спіну та принцип тотожності електронів – у використанні квантової статистики замість класичної і т.д. Це значно спрощує розуміння та побудову моделей, адже набагато простіше уявляти електрон як частинку, аніж як об'єкт, котрому властиві як хвильові, так і корпускулярні властивості.

Таким чином у мікроелектроніці для розв'язання практичних задач переважно вдається уникнути необхідності використання апарату двох специфічних розділів сучасної фізики твердого тіла: квантової теорії та теорії розсіювання. І це незважаючи на те, що хвильові властивості електрона, як і процеси взаємодії з різноманітними дефектами ґратки (розсіювання) зрештою є визначальними з точки зору застосування конкретних матеріалів у тих чи інших цілях.

Метод кінетичного рівняння, строго кажучи, є справедливим лише для систем, що складаються з класичних частинок. Як відомо, у традиційній твердотільній електроніці для опису процесів переносу заряду зазвичай використовується одноелектронне наближення та метод ефективної маси. За допомогою останнього у лівій частині кінетичного рівняння (2.13) з [2.1] квантова природа електронів враховується ефективно через відповідну модифікацію функції розподілу.

Найпоширеніша форма запису кінетичного рівняння для функції розподілу $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} = 4\pi^3 \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_3$$

Фізичний зміст кінетичного рівняння полягає у зміні функції розподілу в даній точці внаслідок просторової неоднорідності розподілу (наявність градієнтів концентрації, температури), впливу зовнішніх полів і зіткнень. Тому часто відповідні доданки називають дифузійним, польовим і таким, що характеризує вплив співударянь.

Сили зовнішніх полів визначаються як $\vec{F} = -e(\vec{E}(\vec{r}, t) + [\vec{v} \times \vec{B}(\vec{r}, t)])$.

Характерним прикладом використання кінетичного рівняння є слабо іонізована газова плазма або електронно-діркова плазма в невідроджених напівпровідниках. У цих випадках кінетичне рівняння називається *рівнянням Больцмана*. Якщо зіткненнями можна знехотити, що добре виконується, наприклад, для дуже розрідженої газової плазми або для електронних потоків у вакуумі, то $[\partial N / \partial t]_c = 0$ й називається *рівнянням Власова*.

В цілому ж, рух електронів вважається класичним. Інтеграл зіткнень у правій частині вказаного рівняння враховує квантову природу електронів [2.1]. Таким чином, при застосуванні метода кінетичного рівняння вважається, що електрони в період між зіткненнями рухаються як класичні частинки; а розсіюються як квантові частинки. З цих причин при використанні кінетичного рівняння його вважають «напівкласичним», бо воно все ж частково враховує квантову природу електронного ансамблю.

Кінетичне рівняння Больцмана є достатнім та дуже потужним засобом моделювання нерівноважних електронних процесів в існуючих компонентах твердотільної електроніки. Однак постає питання, які квантові ефекти можна «загубити», вважаючи рух електронів «класичним» у проміжках між зіткненнями. Один з таких ефектів – тунельний ефект, що полягає в скінченній ймовірності проходження потенціального бар'єру на шляху руху електрона. З нього також витікає можливість знайти електрон у так званій «забороненій зоні», якщо висловлюватися мовою зонної теорії. Такі ефекти можуть суттєво впливати на параметри конкретного електронного компоненту, якщо його характерні розміри менші за певні характерні довжини, якими характеризується електронний колектив. Такими довжинами є:

1. Довжина хвилі де Бройля електрона λ_ϕ , що пов'язана з його хвильовим вектором k співвідношенням: $\lambda_\phi = 2\pi/k$. Електронний колектив

твердого тіла складається з електронів, що мають різне значення хвильового вектора. Тому оцінки $\lambda_{\text{Ф}}$ проводяться для тих значень хвильового вектору, який має переважна кількість електронів, що беруть участь у провідності. За низької температури більшість електронів, що беруть участь у процесах переносу, знаходиться поблизу рівня Фермі. Тому хвильовий вектор k вибирають рівним хвильовому вектору Фермі: $k = k_{\text{Ф}}$. Умовно вважають, що значення довжини хвилі де Бройля в типових напівпровідникових структурах $\lambda_{\text{Ф}} = 35$ нм [2.2]. У конкретному випадку $\lambda_{\text{Ф}}$ може відрізнятися від цього значення.

2. Середня довжина вільного пробігу L_p визначається через час релаксації імпульсу: $L_p = \tau_p \cdot v_{\text{Ф}}$, $v_{\text{Ф}}$ – швидкість Фермі, що визначається за формулою: $v_{\text{Ф}} = \hbar k_{\text{Ф}} / m$, де $k_{\text{Ф}}$ – хвильовий вектор Фермі. Слід відрізнити τ_p від середнього часу вільного пробігу електрона, тобто інтервалу часу між актами розсіювання. Більшість взаємодій електрона з дефектами ґратки супроводжується розсіюванням на малі кути і, відповідно, незначною зміною імпульсу. Характерною є ситуація, коли електрон, перш ніж стати частиною рівноважного колективу, зазнає великої кількості зіткнень. За типової довжини хвилі Фермі $\lambda_{\text{Ф}} = 35$ нм швидкість Фермі приблизно дорівнює $v_{\text{Ф}} = 3 \cdot 10^7$ см/с. Вважаючи, що час релаксації імпульсу $\tau_p = 0,1$ пс, типове значення довжини вільного пробігу L_p складає близько 0,35 мкм.

3. Довжина релаксації фази $L_{\text{Ф}}$ визначається як середній шлях, який має пройти електрон для того, щоб позбутися так званої „фазової пам’яті”. Останнє поняття означає буквально збереження детермінованого зв’язку між фазою хвильової функції електрона в різні моменти часу та в різних точках простору. Роль величини $L_{\text{Ф}}$ полягає в тому, що для спостереження інтерференційних ефектів вона має мати значення більше за розміри системи. Поняття фазової релаксації, хаотизації фази та фазової когерентності не пов’язані безпосередньо з актами пружних чи непружних зіткнень, які не обов’язково призводять до хаотизації фази. І навпаки, рандомізація фази може не супроводжуватися зміною імпульсу чи енергії. Іноді, однак, акт розсіювання супроводжується хаотизацією фази. Прикладом може бути електрон-електронне розсіювання. Однак у більшості випадків хаотизація фази не впливає на величину довжини вільного пробігу, оскільки акти хаотизації в основному пружні. Для розуміння загальної причини хаотизації фази, можна користуватися загальним правилом: флуктуаційні центри розсіювання зумовлюють фазову релаксацію, а стаціонарні центри розсіювання – ні.

Ввівши три характерні довжини, що характеризують електронний колектив, можна дати визначення поняттям макроскопічної, мікроскопічної та мезоскопічної системи.

*Мікроскопічна система*¹ – це система, геометричні розміри якої менші за хоча б один з параметрів λ_F , L_p , L_F електронного колективу в ній. Якщо ж значення усіх трьох параметрів значно менші за геометричні розміри системи, то така система є *макроскопічною*. Саме до таких систем може бути застосований метод кінетичного рівняння. Системи, які не можуть бути віднесені ні до мікроскопічних, ні до макроскопічних називаються *мезоскопічними* (від грецьк. «mesós» – середній, проміжний). Таким чином, *мезоскопічні системи* – це системи, геометричні розміри яких менші за найбільший з параметрів λ_F , L_p , L_F та більші за найменший з них. Слід додати, що мезо- та мікроскопічні системи вважаються такими, якщо відповідні умови виконуються хоча б для одного просторового напрямку, наприклад, нанорозмірні напівпровідникові гетероструктури (надгратки, резонансно-тунельні діоди, транзистори з високою рухливістю електронів (HEMT)).

Зрозуміло, що чіткої границі між трьома введенними типами систем не існує. Частіше за все електронні структури, що мають розміри від кількох десятків нанометрів до 1-2 мкм класифікуються як мезоскопічні. Конкретні цифри визначаються інтенсивністю процесів розсіювання та хаотизації, а також параметрами електронного колективу в кожному конкретному випадку.

Для мікроскопічних систем метод кінетичного рівняння *здебільшого* не може бути застосований принципово. Будучи застосовним до мезоскопічних систем, метод кінетичного рівняння Больцмана дає похибку, що зростає зі зменшенням розмірів системи. З означених причин виникає необхідність використання іншого формалізму для опису мікроскопічних та мезоскопічних систем. Діючими на сьогодні методами, що частково чи повністю виконують функцію метода кінетичного рівняння є [2.3–2.5]:

- метод функції розподілу Вігнера;
- метод нерівноважних функцій Гріна;
- метод функціоналу густини.

Широкого використання набули феноменологічні моделі електронних процесів, такі як: метод хвильових функцій, метод тунельного Гамільтоніану та інші специфічні методи, що розробляються для моделювання конкретного

¹ Поняття «мікроскопічність» тут не прив'язується до геометричних розмірів відповідних систем, а лише вказує на наявність у таких системах квантових ефектів, що не можуть бути враховані в рамках напівкласичного підходу

приладу. Почасти вони найбільш ефективні, однак їх застосовність обмежується вузьким колом структур (для яких справедливі прийняті в них припущення).

Оскільки для моделювання мікроскопічних структур використання кінетичних моделей є не зовсім ефективним, надалі розглядаються феноменологічні.

Якісне уявлення про процеси в структурах, у яких довжина когерентності L_ϕ перевищує геометричні розміри, були розроблені у 1957 році Ландауером [2.6] та розвивалися разом з Буттікером, що призвело до появи феноменологічного формалізму Ландауера-Буттікера, який є системою чисто утилітарних уявлень про явища у мікроскопічних системах, що входять до складу макроскопічної системи. В 1992 році формула Ландауера була строго виведена з уявлень кінетики з урахуванням міжелектронної взаємодії [2.7].

Історична роль Ландауера полягала у тому, що він перший запропонував розглядати задачу про знаходження струму через малі об'єкти у вигляді задачі на проходження та відбивання електронних хвиль (англ. «*scattering problem*» – задача на «розсіювання») на відміну від, скажімо, формалізму Кубо, де задача про знаходження струму розглядалася як задача знаходження лінійного відклику на прикладену напругу.

Незважаючи на поважний вік зазначеного вище формалізму, він склав основу для створення феноменологічних моделей резонансно-тунельних діодів (вперше створених Тсу та Есакі в 1973 р.), одноелектронних транзисторів (вперше створені Ліхарьовим в 1987 р.), вуглецевих нанотрубок (вперше створені Іджімою в 1991 р.) та деяких інших перспективних електронних компонентів, в тому числі – пристроїв молекулярної електроніки [2.8].

Цей формалізм є зрозумілим якісним уявленням про електронні процеси в надмалих системах. Однак, шляхом модифікації та узагальнення можна отримати навіть ефективні кількісні моделі. Хорошими прикладами можуть бути: «комбінована» модель резонансно-тунельного діоду [2.9, 2.10, 1.11], «ортодоксальна» теорія одноелектронного тунелювання [2.12]. та ін., які однозначно більш ефективні, а інколи можуть бути більш точними, ніж *ab initio* моделі (від лат. – «від початку»).

Зауважимо, що метод побудови теорії Ландауера-Буттікера не є типовим, оскільки розглядає конкретне явище для системи, яка приведена до максимально спрощеного виду. Часто застосовують і інші варіанти спрощення – ліміти нульової температури, відсутність розсіювання, нескінченні довжини релаксації, відсутність електрон-електронних взаємодій та ін.

Щоб зрозуміти логіку побудови феноменологічних моделей мікроскопічних систем, базуючись на оригінальній роботі Ландауера [2.6], розглянемо систему, що складається з наступних компонентів:

1. Дві масивні² області, у яких існує тривимірний електронний газ. Їх називають «резервуарами» [електронів]. В реальних пристроях резервуари – це металеві електроди або сильно леговані напівпровідники; вважається, що вони складаються з матеріалів із дуже високою провідністю. У лівому резервуарі зовнішнім джерелом підтримується потенціал V_1 , на правому – V_2 . Масивність резервуарів дозволяє ввести квазірівні Фермі електронів у кожному з них – $E_{\Phi 1}$ та $E_{\Phi 2}$. Тобто електрони в резервуарах розподілені у відповідності з рівноважними функціями Фермі з параметрами $E_{\Phi 1}$ та $E_{\Phi 2}$. Вважається, що електрони, які потрапляють до резервуарів через провідники, миттєво приходять до термодинамічної рівноваги з відповідним рівнем Фермі, тобто не порушують рівноважного характеру розподілу у резервуарах. У реальних резервуарах така ситуація можлива внаслідок термалізації непружних зіткнень. Говорять, що резервуари абсорбують та термалізують усі електрони, які до них потрапляють. Також вважають, що вище квазірівнів Фермі заповнені стани відсутні (що відповідає близькій до 0 К температурі).

2. Ідеальні одновимірні провідники, що з'єднують масивні області з *мікроскопічною системою*. У таких провідниках електрони рухаються без розсіювання і підпорядковані розподілу за енергією з параметром $E_{\Phi 1}$ (лівий провідник) та $E_{\Phi 2}$ (правий провідник). Фактично, провідники – це ідеальні електронні хвилеводи, що сполучають резервуари зі зразком, що знаходиться між ними.

3. *Мікроскопічною системою* може бути короткий провідник, нанотрубка, наноточка, і навіть одна молекула. Саме вона визначає властивості усієї системи і є так званою активною областю. Вважається, що в ній можливе лише пружне розсіювання, а електрони рухаються через обидва провідники та активну область когерентно. Часто цю систему називають просто „центром розсіювання” (англ. «scatterer» – розсіювач).

В оригінальній роботі Ландауера вважалося, що в провідниках, які з'єднують мікроскопічну систему з резервуарами, існує *лише одна* релевантна поперечна мода. Поняття «моди» для електронної хвилі в

² Термін «масивний» тут вживається в тому ж сенсі, що слово “*bulk*” в англійській літературі (напр. «*bulk semiconductor*» – масивний напівпровідник), і в україномовній літературі перекладається як «тривимірний», тобто такий, що має чітку трансляційну симетрію у всіх просторових вимірах, на відміну від низькорозмірних структур, де один, два чи три просторові розміри достатньо малі для того, щоб спостерігалася квантування (тобто якщо дискретний спектр не можна вважати квазінеперервним)

деякому розумінні подібне до моди електромагнітної хвилі в хвильоводах; а наявність однієї моди в провідниках аналогічна одномодовому режимові розповсюдження хвиль у хвильоводі. Строго кажучи, одновимірних провідників у тривимірному просторі існувати не може; однак якщо поперечні розміри такої системи (l_x та l_y) досить малі, то можна чітко виділити квантування поперечних складових енергії (E_x та E_y), що можуть набувати дискретних значень і які можна пронумерувати індексами i, j (нагадаємо, що моди у хвильоводі теж нумеруються двома індексами) і ввести поняття так званих „поперечних енергій” $E_{i,j} = E_{x,i} + E_{y,j}$, які набувають дискретних значень. Моди розповсюдження електрона (електронної хвилі) визначаються номерами i, j . В той же час z -складова енергії і надалі може набувати квазінеперервних значень. Наявність однієї моди (або, як іноді кажуть, одного каналу) у провідниках відповідає ситуації, коли максимальна енергія електрона в резервуарах $E = E_z + E_{i,j}$ не перевищує $E_{1,2}$ (вважається, що $E_{1,2}$ – найменша з можливих власних поперечних енергій після $E_{1,1}$).

Вважається, що процес пружного розсіювання електрона на центрі розсіювання може бути охарактеризовано ймовірністю проходження T та ймовірністю відбивання R , між якими в силу припущення про пружність розсіювання виконується рівність: $T + R = 1$. Нехай напруга прикладається так, що $E_{\Phi 1} > E_{\Phi 2}$ (рис. 2.1).

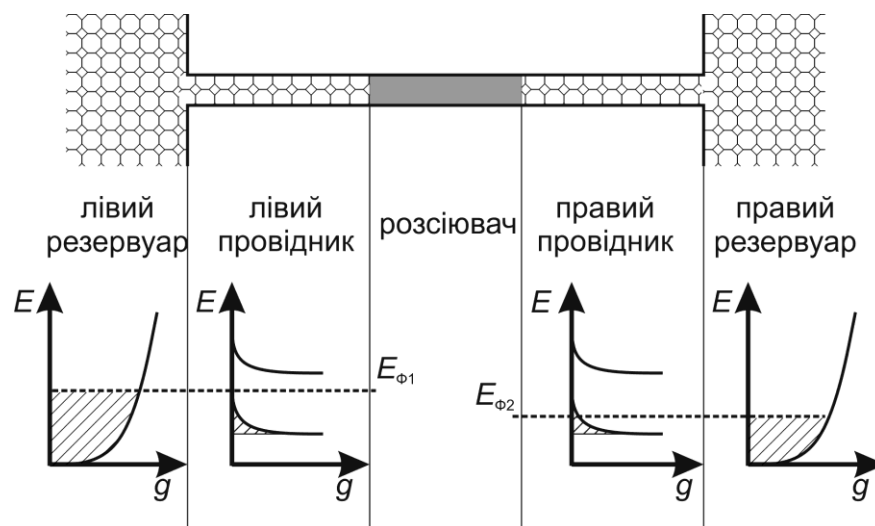


Рис. 2.1. Схема поділу системи, що містить мікроскопічний провідник, на області та густина електронних станів в одновимірних провідниках та резервуарах

Струм через «розсіювач», тобто через мікроскопічну систему, що вбудована в макроскопічну систему, як показано на рис. 2.1., може бути розрахований як алгебраїчна сума струмів, створених електронами, що

інжектуються у лівий (правий) провідник із лівого (правого) резервуару. Вважається, що ці два потоки між собою не взаємодіють.

Для того, щоб не обтяжувати розрахунки, покладемо: $E_{1,1} = 0$. За таких умов z -складова енергії електронів в лівому (правому) провіднику $E_z = E$, і змінюється у тих же межах, що і повна енергія електрона E у резервуарах, тобто від 0 до $E_{\Phi 1}$ у лівому та від 0 до $E_{\Phi 2}$ у правому провіднику (нагадаємо, що для спрощення ми проводимо розрахунки в діапазоні вкрай низьких температур $T \rightarrow 0$ K). У потоці електронів, що інжектуються з лівого (правого) резервуару до лівого (правого) провідника є лише електрони з $k_z > 0$ ($k_z < 0$), тобто електрони, що рухаються в напрямку до розсіювача ($v_z = \hbar k_z / m$). Інжектовані електрони, швидкість яких лежить в межах від v_z до $v_z + dv_z$ (відповідно, хвильовий вектор від $k_z = mv_z / \hbar$ до $k_z + dk_z$), створюють елементарні струми у відповідності з визначенням електричного струму та основами статистичної фізики:

$$dJ_{1(2)} = eN_{1(2)}(k_z)T(v_z)v_z dv_z = eN_{1(2)}(k_z)T(k_z)v_z(k_z)dk_z, \quad (2.1)$$

де $J_{1(2)}$ – струм електронів, що інжектуються в лівий (правий) провідник з лівого (правого) резервуару; $T(k_z)$ – ймовірність проходження електрона з хвильовим числом k_z ; $N_{1(2)}(k_z)$ – функція розподілу електронів у лівому (правому) резервуарі в одновимірному k_z -просторі, $N_{1(2)}(k_z) = g(k_z) \cdot f_{1(2)}(k_z)$.

У випадку наявності всього однієї моди $g(k_z) = g_{ij} = 2/2\pi$, $f_{1(2)}$ – ймовірність заповнення електронних станів,

$$f_{1(2)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{\Phi 1(\Phi 2)}}{k_B T}\right)} = \begin{cases} 1, & \text{якщо } E < E_{\Phi 1(\Phi 2)}, \\ 0, & \text{інакше.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Підсумковий струм можна отримати з (2.1), додаючи відповідні струми інжекції з лівого та правого резервуару, J_1 та J_2 :

$$\begin{aligned} J &= J_1 + J_2 = \frac{e}{\pi} \left\{ \int_0^{\infty} f_1(k_z)T(k_z)v(k_z)dk_z + \int_{-\infty}^0 f_2(k_z)T(k_z)v(k_z)dk_z \right\} = \\ &= \left\{ \int_0^{\infty} f_1(k_z)T(k_z)v(k_z)dk_z - \int_0^{\infty} f_2(k_z)T(k_z)v(k_z)dk_z \right\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Проводячи заміну змінної інтегрування k_z на E_z : $dk_z = (dk_z/dE_z)dE_z$ та користуючись тим, що

$$v_z(k_z) \cdot dk_z/dE_z = k_z/m \cdot dk_z/dE_z = 1/\hbar \cdot d(\hbar^2 k_z^2 / 2m)/dE_z = 1/\hbar ,$$

а в першому (другому) інтегралі (1.3) з урахуванням (1.2) верхня границя дорівнюватиме $E_{\Phi 1}(E_{\Phi 2})$, отримаємо:

$$J = \frac{e}{\pi\hbar} \left\{ \int_0^{E_{\Phi 1}} T(E_z) dE_z - \int_0^{E_{\Phi 2}} T(E_z) dE_z \right\} = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{E_{\Phi 2}}^{E_{\Phi 1}} T(E_z) dE_z . \quad (2.4)$$

Подальші спрощення можна отримати, вважаючи, що прикладена напруга $V = (E_{\Phi 1} - E_{\Phi 2})/e$ мала (режим лінійного відклику). У такому випадку можна вважати, що $T(E_z) = \text{const}$, і формула (2.4) переписеться:

$$J = \frac{e^2}{\pi\hbar} T \frac{(E_{\Phi 1} - E_{\Phi 2})}{e} = \frac{e^2}{\pi\hbar} TV . \quad (2.5)$$

Рівняння (2.5) – одна з форм запису відомої *формули Ландауера*. У випадку, якщо центром розсіювання на рис. 2.1 є просто балістичний провідник (тобто $T = 1$), залежність струму від напруги приймає вигляд:

$$J = VG_k = V/R_k , \quad (2.6)$$

де $R_k = G_k^{-1} = \frac{\pi\hbar}{e^2}$ – так званий *квант опору*, який з 1990 р. є універсальною

сталою – так званою сталою фон Клітцинга; $R_k = 25\,812,807 \text{ Ом} \approx 25 \text{ кОм}$.

Говорять, що *опір одновимірного одномодового провідника* (під провідником, згідно нашої термінології, мається на увазі розсіювач) *не може бути меншим за величину кванту опору*. Бачимо, що наявність мінімального опору зумовлює *насичення провідності* за умови одномодовості.

Для випадку, коли у діапазоні від $E_{\Phi 1}$ до $E_{\Phi 2}$ у провіднику може існувати більше одного рівня енергії, вираз для провідності, що вводиться в (2.6) набуде вигляду:

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} \sum_{i,j} T_{i,j}(V) ,$$

з чого видно, що зі зростанням напруги провідність буде стрибкоподібно зростати на величину $G_k T_{ij}$ при потраплянні рівня E_{ij} у діапазон $[E_{\Phi 2}; E_{\Phi 1}]$ (рис. 2.2).

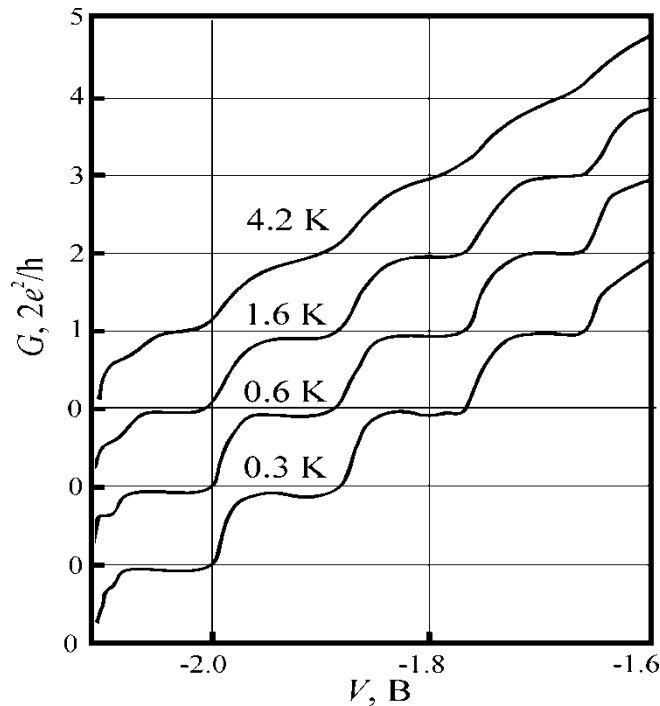


Рис. 2.2 – Квантування провідності G в квантовому точковому контакті в одиницях $2e^2/h$ (адаптовано з [2.13])

Нагадаємо, що опір ідеального провідника згідно з класичними уявленнями (які ґрунтуються на кінетичному рівнянні Больцмана) зменшується пропорційно його довжині, а у випадку відсутності в ньому розсіювання («балістичний провідник») опір дорівнює нулю. Це різко контрастує із описаними нами закономірностями, а також експериментальними даними, що підтверджують адекватність формули Ландауера для опису мікроскопічних «балістичних» провідників (рис. 2.2).

Таким чином, вище показано у чому полягає ідея формалізму Ландауера-Буттікера та його можливості для опису процесів, що відбуваються в одновимірній мікроскопічній системі, яка є однією з найпростіших систем такого типу, яку можна реалізувати на практиці. Отримані результати не можуть бути знайдені за допомогою методу кінетичного рівняння.

Ще одним «класичним» прикладом структур низької розмірності є напівпровідникові гетероструктури. Якщо в гетероструктурі характерний розмір лише в одному просторовому вимірі сумірний з λ_Φ , L_p , або L_Φ , то це означає, що така структура містить тонкі плівки різних напівпровідників шириною порядку кількох нанометрів. Якщо в силу конструкції напруга

прикладається перпендикулярно до площин розділу нанорозмірних шарів, то говорять, що в таких конструкціях реалізується *поперечний транспорт*, а самі структури називаються *структурами з поперечним електронним транспортом*. Прикладом таких структур є резонансно-тунельні діоди, надгратки, різноманітні пристрої функціональної електроніки на їх основі.

Проблема, з якою має справу наноелектроніка при моделюванні структур з поперечним транспортом, типова для галузі в цілому. Уявлення про електронний транспорт у «старих» пристроях, не можуть відображати реальні процеси, що відбуваються в «нових» пристроях.

Формувати засади теоретичної наноелектроніки доводиться на тому самому фундаменті, на яких у свою чергу була побудована мікроелектроніка: багаточастинкова квантова теорія у широкому розумінні цього поняття, що включає у себе спецрозділи: статистичну фізику для опису рівноважних систем, квантову кінетику – для нерівноважних; теорію розсіювання та деякі інші розділи теоретичної фізики.

Однак, на сьогодні більшість моделей наноструктур є феноменологічними та *не* виводяться строго з положень теоретичної фізики. Їх виникнення пояснюється відставанням теоретичної наноелектроніки від експериментальної. У той час як експериментальні зразки вже виготовлені і функціонують, виявляючи потрібні властивості, адекватні *ab-initio* моделі процесів залишаються рідкістю.

2.2. Метод хвильових функцій. Узагальнення методу ефективної маси

Рух електронів у гетероструктурах можна описати багаточастинковим рівнянням Шредінгера, яке рядом апроксимацій зводиться до системи *незалежних* між собою рівнянь для кожного з електронів [2.14]:

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (2.7)$$

де ψ – одноелектронна хвильова функція, E – енергія електрона; \hat{H} – оператор Гамільтона в одноелектронному наближенні,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad (2.8)$$

у якому m – маса спокою електрона, \hbar – стала Планка, $V(\mathbf{r})$ – потенціальна енергія електрона у полі всіх інших електронів та іонів, що не змінюється при зміщенні на вектор трансляції \mathbf{a} : $V(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = V(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$ – неперіодична частина потенціальної енергії електрона, яка обумовлена зовнішніми полями, зокрема, розривами екстремумів зон у гетероструктурах, прикладеною напругою та об’ємним зарядом.

Для розв’язання рівняння Шредінгера у *масивному* напівпровіднику існує простий метод, який дозволяє позбавитися розгляду члену $V(\mathbf{r})$. Це так званий *метод ефективної маси*. Він базується на тому, що поблизу екстремумів зон рівняння (2.7) з Гамільтоніаном (2.8) можна представити рівнянням (2.7) з Гамільтоніаном:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}), \quad (2.9)$$

Функції, що є розв’язком рівняння Шредінгера з Гамільтоніаном (2.9), коректно називати «*обвідними хвильової функції*», а не просто «хвильовими функціями». Така назва обумовлена тим, що при $U(\mathbf{r}) = \text{const}$ розв’язком (2.7) є функції Блоха: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, де функція $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ повторює періодичність ґратки та суттєво змінюється протягом періоду ґратки. Множник $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ поблизу екстремумів зон змінюється на періоді ґратки повільно, тому він фактично є обвідною всієї хвильової функції. Якщо $U(\mathbf{r})$ повільно змінюється на періоді ґратки, то можна показати, що це практично не вплине на $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$; натомість зміна відобразиться на другому члені [2.15]. Так, в $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ можна ввести залежність хвильового вектору від координати $\mathbf{k}(\mathbf{r})$ або ж замінити $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ на $\psi(\mathbf{r})$, що повільно змінюється: $\psi(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r})\mathbf{r}} = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$. Функція $\psi(\mathbf{r})$ фактично і є шуканою у рівнянні (2.7) з Гамільтоніаном (2.9); природно, що її теж називають «обвідною». Далі, однак, будемо позначати обвідну хвильової функції через $\psi(\mathbf{r})$, якщо не буде вказано інше.

Метод ефективної маси використовується у традиційній електроніці, зокрема, для розрахунку локалізованих станів електрона у кристалі [2.14]. Його з деякими модифікаціями використовують і для розв’язання рівняння Шредінгера у гетероструктурах.

Якщо вважати, що $U(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді:

$$U(\mathbf{r}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z),$$

то рівняння (2.9) розпадеться на три незалежних рівняння:

$$\hat{H}_x \psi_x = E_x \psi_x, \quad (2.10)$$

$$\hat{H}_y \psi_y = E_y \psi_y, \quad (2.11)$$

$$\hat{H}_z \psi_z = E_z \psi_z, \quad (2.12)$$

а його розв'язок можна буде шукати у вигляді: $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$; $E = E_x + E_y + E_z$

[2.16]. Тут $\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + U(z)$; аналогічно визначаються \hat{H}_x та \hat{H}_y .

Розглянемо структуру з поперечним транспортом, що містить гетерограниці, які задані рівняннями $z = \text{const}$. Згідно поданого визначення структури з поперечним транспортом складові $U_x(x)$, та $U_y(y)$ можна відповідним вибором початку відліку потенціальної енергії прирівняти до нуля. Тому рівняння (2.10) та (2.11) будуть мати тривіальні розв'язки у вигляді плоских хвиль:

$$\psi_{\parallel} \sim \psi_x \psi_y e^{i(k_x x + k_y y)} \equiv e^{i(\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r})}.$$

Натомість, у напрямку $0z$ слід розв'язувати рівняння Шредінгера (2.8), яке у розкритому вигляді записується:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + U(z) \psi_z = E_z \psi_z, \quad (2.13)$$

В подальшому нас цікавитиме лише складова обвідної ψ_z , яку ми будемо називати, опускаючи індекс, через ψ .

2.3. Граничні умови

Найпростішим компонентом гетероструктури є гетерограниця. Розглянемо процеси, що відбуваються поблизу границі двох матеріалів А та Б, що знаходиться в площині $z = a$. Відомо, що потенціальна енергія електрона зони провідності зазнає різкої зміни на гетерограниці, у першому наближенні – стрибкоподібної. Різні приклади гетерограниць зображені на рис. 2.3. Крім того, стрибкоподібної зміни зазнає також ефективна маса, яка у матеріалах А та Б в загальному випадку різна.

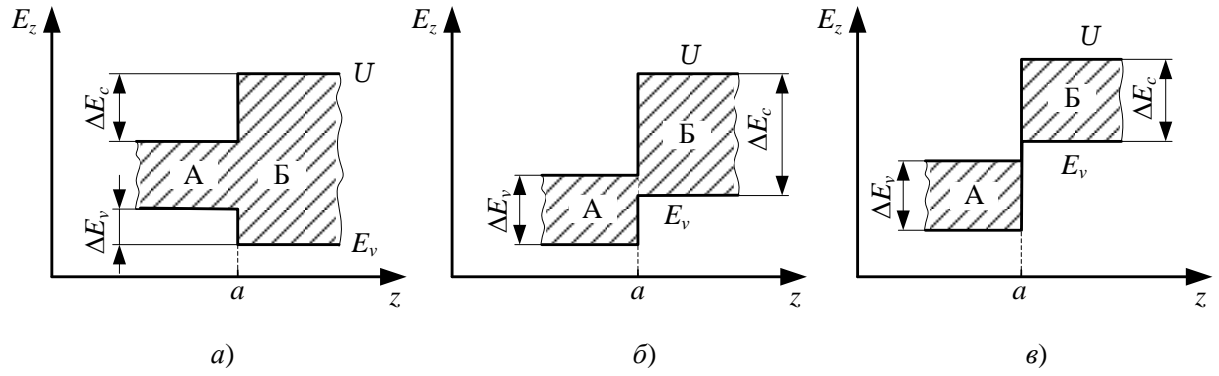


Рис. 2.3 – Типи гетеропереходів: а) перехід I типу (А-Б = GaAs-AlGaAs; GaSb-AlSb; GaAs-GaP; InGaAs-InAlAs; InGaAs-InP); б) перехід II типу (А-Б = InP-Al_{0.48}In_{0.52}As; InP-InSb; BeTe-ZnSe; GaInP-GaAsP; Si-SiGe); в) перехід III типу (А-Б = InAs-GaSb)

Розглянемо електрон у зоні провідності (ЗП) поблизу гетерограниці GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As, що знаходиться в площині $z = a$. На границі цієї гетеропари відбувається рух електронів провідності в рамках Γ -долини, яка є найнижчою для обох сполук. Саме для такого випадку подаються подальші викладки.

Запишемо рівняння Шредінгера для обвідної хвильової функції в околиці площини $z = a$ ліворуч та праворуч:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_A\psi = E_z\psi (z = a^+) \quad (2.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_B\psi = E_z\psi (z = a^-), \quad (2.15)$$

де індексами «А» та «Б» позначені відповідні величини в сполуках «А» та «Б».

Позначимо розв'язки рівнянь (2.14) та (2.15) через ψ_A та ψ_B відповідно. Вважається, що на гетерограниці періодична складова хвильової функції $u_{nk}(\mathbf{r})$ та її похідна неперервні [2.17]. Тоді з вимоги до неперервності хвильової функції слідує неперервність її обвідної, і мусимо покласти:

$$\psi_A(a) = \psi_B(a). \quad (2.16)$$

Зі звичайного рівняння Шредінгера можна отримати закон збереження густини потоку ймовірності, який визначається за формулою:

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad [2.16].$$

Запишемо вирази для z -проекцій потоків густини

ймовірності в обвідній хвильовій функції у площинах $z = a^+$ та $z = a^-$, J_A та J_B відповідно:

$$J_A = \frac{i\hbar}{2m_A} \left(\psi_A^* \frac{d\psi_A}{dz} - \psi_A \frac{d\psi_A^*}{dz} \right), \quad (2.17)$$

$$J_B = \frac{i\hbar}{2m_B} \left(\psi_B^* \frac{d\psi_B}{dz} - \psi_B \frac{d\psi_B^*}{dz} \right). \quad (2.18)$$

Виконання фундаментального закону збереження густини потоку ймовірності в квантовій механіці слідує зі звичайного рівняння Шредінгера. Цей закон автоматично виконується для рівняння Шредінгера зі звичайною, сталою масою електрона. Але у площині точці $z = a$, *відповідно до прийнятої моделі*, ефективна маса зазнає стрибкоподібної зміни. Тому для виконання закону збереження необхідно примусово накласти умову:

$$J_A = J_B, \quad (2.19)$$

з чого слідує, що

$$\frac{1}{m_A^*} \frac{d\psi_A}{dz} = \frac{1}{m_B^*} \frac{d\psi_B}{dz}. \quad (2.20)$$

Рівняння (2.16) та (2.20) являють собою загальні вимоги до обвідної хвильової функції та її похідної на гетерограниці, і є хорошими наближеннями для більшості гетерограниць. Їх можна записати в неявному, однак компактному вигляді, внісши під першу похідну в (2.7) ефективну масу:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d^2\psi_z}{dz^2} + U(z)\psi_z = E_z\psi_z. \quad (2.21)$$

Рівняння (2.21) широко застосовується для моделювання електронного транспорту в гетероструктурах; його також застосовують, коли ефективна маса змінюється плавно. Останнього ефекту можна досягти, наприклад, змінюючи молярну долю x в $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ від нуля до 33% протягом кількох нанометрів. Такі структури називаються «варізонними». Їх дозволяють виготовляти сучасні технології:

- молекулярно-променевої епітаксії (англ. абревіатура – *MBE*);
- хімічне випаровування металоорганічних сполук з газової фази (*MOCVD*).

Рівняння (2.21) часто називають *рівнянням Шредінгера з ефективною масою*³. Воно є ключовим компонентом так званого „методу обвідної хвильової функції”, що застосовується для моделювання гетероструктур. Назва цього методу є синонімом *методу ефективної маси*. У вітчизняній літературі часто опускають слово «обвідна» та говорять просто «метод хвильових функцій».

Контрольні запитання та вправи

- 2.1. У чому полягає особливість моделювання на основі кінетичного рівняння Больцмана?
- 2.2. Які критерії застосовуються для оцінки розмірних ефектів? Поясніть суть понять довжина хвилі де Бройля і довжина релаксації фази електрона.
- 2.3. Поясніть положення і суть теорії Ландауера-Буттікера.
- 2.4. У чому полягає суть методу ефективної маси? Які припущення застосовуються при цьому?
- 2.5. Яким чином представляється наноструктура для реалізації теорії Ландауера-Буттікера?
- 2.6. Що описує обвідна хвильової функції? Наведіть практичні приклади застосування цієї функції для моделювання.
- 2.7. Які типи гетеропереходів застосовуються на практиці і для яких типів матеріалів? Наведіть приклади таких гетеропереходів.
- 2.8. Як впливають стехіометричні параметри сполук на їх властивості?

³ англ.: *effective mass Schrodinger equation*

3. ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ І МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ У КВАНТОВИХ ТОЧКАХ

3.1. Квантові точки як нульвимірні системи

Потенціальні ями можуть бути рукотворними і їх можна створювати, наприклад, для електронів провідності напівпровідників. Енергетичні властивості таких гетероструктур необхідно описувати на основі підходів квантової фізики. Це означає, що потенціальна енергія цієї гетероструктури може змінюватися тільки дискретним чином. У такому разі, якщо гетероструктура з атомів переходить з одного стану в інше, вона має випромінювати або поглинати квант світла тієї довжини хвилі, яка відповідає різниці енергій між цими станами.

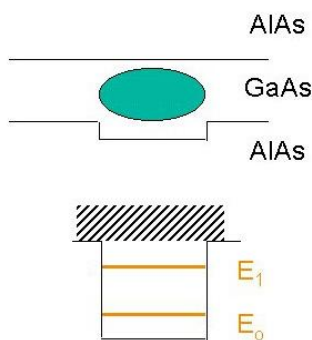


Рис. 3.1. Утворення квантової точки при внесенні GaAs (зелений овал) до ями прямокутної форми в AlAs. Внизу - потенціальна яма з двома енергетичними рівнями E_0 і E_1 , перехід між якими відповідає жовтому кванту світла

Одним із способів змусити атоми об'єднуватися в гетероструктуру – зробити мікронеоднорідність, тобто щось змінити в деякій точці простору, і тоді ця область може виявитися переважною для групи якихось атомів.

Квантовими точками називають широкий клас квазінульвимірних систем, в яких проявляється ефект розмірного квантування енергетичних спектрів електронів, дірок і екситонів.

До цього класу перш за все відносять напівпровідникові кристали, у яких всі три просторові розміри сумірні за порядком величини з боровським

радіусом екситону в об'ємному матеріалі. Дане визначення припускає, що квантова точка знаходиться у вакуумі, газовому або рідкому середовищі, або обмежена яким-небудь твердотільним матеріалом, що відрізняється від матеріалу, з якого вона виготовлена (рис.3.1).

У цьому випадку тривимірне просторове обмеження (конфайнмент) елементарних збуджень у квантовій точці обумовлене наявністю меж розділу між різними матеріалами і середовищами, тобто існуванням гетерограниць. Такі квантові точки часто називають нанокристалами. Проте це просте

визначення не є повним, оскільки є квантові точки, для яких гетерограниці в одному або двох вимірах відсутні.

Не зважаючи на це трансляція електронів, дірок або екситонів в таких квантових точках просторово обмежена через наявність потенціальних ям, що виникають, наприклад, завдяки механічній напрузі або флуктуаціям товщини напівпровідникових шарів.

У такому сенсі можна сказати, що квантова точка – це будь-яка тривимірна потенціальна яма, заповнена напівпровідниковим матеріалом, з характерними розмірами порядку боровського радіусу екситону в об'ємному матеріалі, в якій трансляція електронів, дірок і екситонів просторово обмежена у трьох вимірах.

У даний час для виготовлення квантових точок застосовують практично будь-які напівпровідникові сполуки, наприклад, A_1B_7 , A_2B_6 і A_3B_5 , A_4B_6 , а також Ge і Si.

Серед всього різноманіття різних квантових точок можна виділити декілька основних типів, які найчастіше використовуються в експериментальних дослідженнях і практичних застосуваннях. Перш за все це нанокристали у рідинах, сполуках і в матрицях широкозонних діелектриків. Якщо вони вирощуються в рідинах або скляних матрицях, то, як правило, мають сферичну форму. Саме у такій системі, що була квантовими точками з CuCl у силікатному склі, при дослідженні однофотонного поглинання був вперше виявлений ефект тривимірного розмірного квантування екситонів.

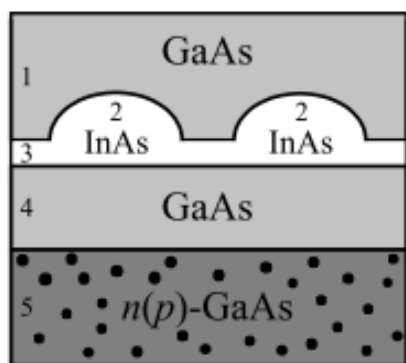


Рис. 3.2. Квантові точки, що самоорганізуються, вирощені методом Страньски-Крастанова. 1 і 4 — буферні шари GaAs, 2 — квантові точки InAs, 3 — шар, що змочує InAs, 5 — легована підкладка GaAs

Іншим важливим типом квантових точок є так звані квантові точки, що самоорганізуються, які виготовляються методами Фольмера-Вебера і Страньски-Крастанова за допомогою техніки молекулярно-променевої або газофазної епітаксії (рис.3.2).

Такі квантові точки утворюються завдяки механічній напрузі, що виникає в тонкому шарі напівпровідника, нанесеного на поверхню матеріалу з меншою сталою ґратки, через розузгодження сталих ґратки

матеріалів гетерограниць. Суттєвою особливістю методу Странські–Крастанова є те, що квантові точки, що отримуються з його допомогою, зв'язані між собою за допомогою надтонкого шару, що змочує, матеріал якого співпадає з матеріалом квантових точок.

Таким чином, в них відсутня одна з гетерограниць. До цього ж типу, в принципі, можуть бути віднесені пористі напівпровідники, наприклад, поруватий кремній, а також потенціальні ями у тонких напівпровідникових шарах.

Квантові точки, що індукуються механічною напругою, можна віднести до третього типу (рис.3.3). Вони утворюються у тонких напівпровідникових шарах завдяки локальній механічній напрузі, яка виникає в них через наявність на поверхні верхнього буферного шару напружених нанорозмірних структур, квантових точок, що наприклад самоорганізуються. Ця механічна напруга призводить до появи у тонкому шарі тривимірної потенціальної ями для електронів, дірок і екситонів. З рисунку видно, що такі квантові точки не мають гетерограниць у двох напрямках.

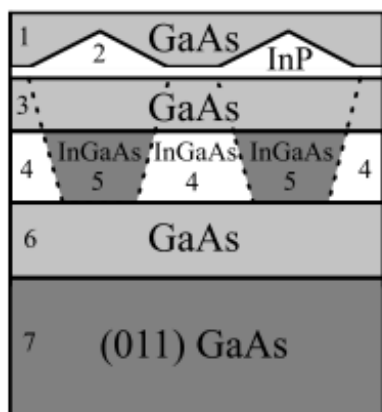


Рис. 3.3. Структура з індукованою механічною напругою InGaAs квантовими точками. 1 — накриваючий шар GaAs; 2 — InP, що самоорганізовуються, квантові точки, які задають механічну напругу, що приводить до виникнення тривимірних потенціальних ям в шарі InGaAs; 3 і 6 — буферні шари GaAs; 4 — тонка квантова яма InGaAs, в якій утворюються індуковані механічною напругою квантові точки; 5 — квантові точки; 7 — підкладка GaAs. Пунктир — профілі механічної напруги

Характерний лінійний розмір області просторового обмеження руху електронів, дірок і екситонів в квантовій точці такий малий, що виникає ефект розмірного квантування їх енергетичних спектрів. Проте тривимірне просторове обмеження приводить не тільки до розмірного квантування електронної підсистеми твердого тіла, але і до квантування інших його підсистем, що мали у початковому об'ємному матеріалі неперервний енергетичний спектр, наприклад, коливальної підсистеми (фононів). Крім того, просторове обмеження модифікує взаємодію різних квазічастинок квантової точки один з одним і із зовнішніми полями. Перебудова енергетичного спектру квантових точок у порівнянні з об'ємними

матеріалами і зміна взаємодій їх елементарних збуджень, що індукується просторовим обмеженням, виявляються у відгуках таких об'єктів на зовнішні збурення.

Зокрема, радикально модифікуються такі оптичні відгуки квантових точок, як одно- і багатотонне поглинання, квазіпружне, комбінаційне і гіперкомбінаційне розсіяння світла, а також різні типи люмінесценції.

Змінюються спектральні положення ліній, їх ширина і відносна амплітуда, а крім того, істотно змінюються швидкості дефазування оптичних переходів і швидкості релаксації збуджених станів, якими визначаються нестационарні відгуки квантових точок на імпульсне оптичне збудження.

3.2. Електронна підсистема квантових точок

Ефект розмірного квантування полягає у тому, що при зменшенні лінійних розмірів об'єкту квазінеперервні енергетичні спектри і хвильові функції його елементарних збуджень радикально модифікуються. У квантових точках виникають дискретні рівні розмірного квантування (рис.3.4).

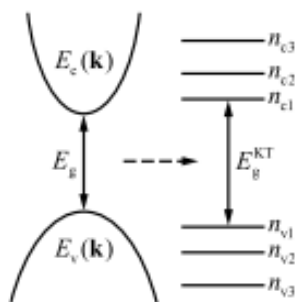


Рис. 3.4. Трансформація неперервного енергетичного спектру зони провідності $E_c(k)$ і валентної зони $E_v(k)$ об'ємного напівпровідника в дискретний спектр станів квантової точки

Тут E_g і E_g^{KT} – ширина забороненої зони в об'ємному матеріалі і в квантовій точці, n_{ci} і n_{vi} – набори квантових чисел, які відповідають станам зони провідності і валентної зони ($i = 1, 2, 3$)

Даний ефект може бути розглянутий для випадку напівпровідникових квантових точок простої форми, вбудованих в діелектричне середовище.

Для опису енергетичного спектру і хвильових функцій низькорозмірних систем найчастіше використовується та чи інша форма методу ефективної маси

(*k*-*p*-теорія збурень), детально розробленого для об'ємних твердих тіл. Привабливість цього підходу заснована на тому, що він у ряді випадків дозволяє отримувати аналітичні результати, які явно враховують граничні умови і форму нанорозмірних структурних елементів.

Крім того, в рамках ***k-p-теорії*** збурень відносно легко врахувати взаємодії електронної підсистеми низькорозмірних систем з коливаннями ґратки, статичними деформаціями і зовнішніми полями.

Даний підхід дозволяє пояснити багато якісних закономірностей, властивих низькорозмірним системам, навіть на основі простої двозонної моделі напівпровідника, яка явно враховує лише одну зону провідності (с) і одну валентну зону (v). Докладно опис електронних і фононних систем, а також характерних для гетероструктур механізмів розсіяння наведено у роботах [3.1-3.2].

Одночастинкові стани. В одноелектронному наближенні хвильова функція $\psi(\mathbf{r})$ і енергетичний спектр E носія заряду усередині квантової точки визначаються рівнянням Шредінгера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + W(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

$$W(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})$$

де m_0 — маса вільного електрона, $W(\mathbf{r})$ — повний потенціал, що діє на електрон (дірку) у кристалі, і є сумою періодичного (з періодом прямої ґратки) потенціалу $U(\mathbf{r})$ і статичного потенціалу $V(\mathbf{r})$, який просторово обмежує рух носіїв заряду усередині квантової точки. У загальному випадку потенціал $V(\mathbf{r})$ не має симетрії і його відносна зміна на масштабі елементарної області передбачається малою.

Оскільки за кімнатної температури носії заряду у напівпровідниках розташовуються поблизу екстремумів енергетичних зон, то для опису властивостей носіїв досить знати їх хвильові функції і енергетичний спектр поблизу даних екстремумів. Основна ідея ***k-p-теорії*** збурень полягає у представленні хвильової функції електрона (дірки) у вигляді лінійної комбінації добутків, що швидко осцилюють в області елементарного об'єму кристала блохівських функцій $\chi_{jk}(\mathbf{r})$, узятих в точці екстремуму \mathbf{k}_0 зони j , і поволі змінних у масштабі елементарної комірки обвідних хвильових функцій $\psi_j(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \psi_j(\mathbf{r}) \chi_{jk_0}(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

Функції $\chi_{jk}(\mathbf{r})$ є розв'язками рівняння Шредінгера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \chi_{jk}(\mathbf{r}) = E_j(\mathbf{k}) \chi_{jk}(\mathbf{r})$$

і створюють ортонормований базис в елементарному об'ємі і мають період кристалічної ґратки.

У разі простої орбітально-невиродженої зони j з екстремумом в центрі зони Бріллюена (наприклад, зони провідності у прямозонних напівпровідниках A_3B_5) в (3.2) залишається лише один доданок $\Psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})\chi_j(\mathbf{r})$.

Тоді за допомогою стандартної процедури, розробленої для опису електронів у полі періодичного потенціалу для **обвідних хвильових функцій** квантової точки можна отримати таке рівняння Шредінґера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

де m^* — ефективна маса носія заряду у даній зоні; $E = E - E_j(0)$, $E_j(0)$ — енергія в екстремумі j -ої зони.

Звідси витікає, що для однозонної моделі квантової точки задача на власні значення зводиться до добре відомої з курсу квантової механіки, наприклад, задачі про рух частинки у потенціальній ямі.

Розглянемо модель квантової точки, для якої рівняння (3.3) допускає аналітичний розв'язок.

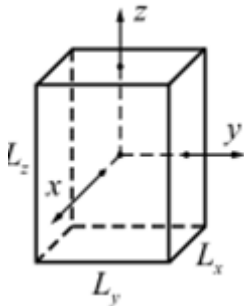


Рис. 3.5. Система координат, що використовуються для обчислення огинаючої хвильової функції квантової точки у формі прямокутного паралелепіпеда

Квантова точка у формі прямокутного паралелепіпеда з непроникними границями має найбільш прості хвильові функції і енергетичний спектр. Припустимо, що потенціальна яма, що моделює таку точку, займає область простору

$$\mathbf{QD} = \left[\begin{array}{l} -L_x/2 \leq x \leq L_x \\ -L_y/2 \leq y \leq L_y \\ -L_z/2 \leq z \leq L_z \end{array} \right] ,$$

де L_u — довжина ребра паралелепіпеда в одному з напрямів $u = x, y, z$ (рис.3.5). Тоді потенціал $V(\mathbf{r})$ можна представити у вигляді

$$V(\mathbf{r}) = \left\{ \begin{array}{l} 0, \mathbf{r} \in \mathbf{QD} \\ \infty, \mathbf{r} \notin \mathbf{QD} \end{array} \right\} . \quad (3.4)$$

У такому разі поза областю ями квантової точки зв'язані стани носіїв заряду відсутні. Усередині потенціальної ями рівняння Шредінґера (3.3), записане у декартових координатах, має вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

і розв'язується розділенням змінних.

Як показано у роботі [3.1] хвильова функція і енергетичний спектр носіїв заряду у квантовій точці можуть бути представлені такими виразами:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z)$$

$$\psi_{n_u}(u) = \sqrt{\frac{2}{L_u}} \begin{cases} \sin(k_{n_u} u), n_u - \text{парне} \\ \cos(k_{n_u} u), n_u - \text{непарне} \end{cases}$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right).$$

У разі, коли глибина потенціальної ями є скінченною, аналітичний розв'язок рівняння (3.3) відсутній.

З наведених рівнянь витікає, що тривимірне просторове обмеження руху носіїв заряду у квантовій точці приводить до розщеплювання їх безперервного енергетичного спектру $E_{c(v)}(k) = \hbar^2 k^2 / [2m_{c(v)}^*]$ на дискретні рівні розмірного квантування $E_{n_x n_y n_z}^{c(v)}$. При цьому виявляється, що енергія дискретних рівнів обернено пропорційна квадрату характерного розміру квантової точки. Зокрема, для кубічної квантової точки з довжиною ребра L $E_{n_x n_y n_z} \sim L^{-2}$. Ця особливість енергетичного спектру має місце і для інших типів квантових точок. За умови $L_x \neq L_y \neq L_z$ рівні в спектрі невироджені. Інакше частина рівнів виявляється виродженою. Так, для квантової точки кубічної форми рівні з квантовими числами, що задовольняють рівнянню

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \text{const}$$

мають однакові енергії.

Слід зазначити важливі якісні особливості, характерні для квантових точок. Енергетичний спектр залежить як від їх розмірів, так і від їх форми. Крім того, геометрична симетрія квантових точок, що виявляється в явному вигляді для обвідних хвильових функцій електронних (екситонних) станів, визначає правила відбору за різними квантовими переходами між цими станами. В той же час власні функції і власні енергії, отримані в рамках таких наближень, не можуть бути універсальними і не описують властивості багатьох реальних низькорозмірних систем. Дійсно, одним з

надзвичайно сильних припущень, яке дозволило знайти аналітичні вирази для енергетичних спектрів електронної підсистеми квантових точок, є твердження про нескінченну глибину потенціальних ям для електронів, дірок і екситонів. Звідси витікає, що як граничні умови може використовуватися вимога рівності нулю обвідних хвильових функцій на межі розділу матеріалів. Проте, як наголошувалося вище, модель з нескінченними потенціальними ямами може бути більш-менш адекватна для ізольованих наноструктур, що знаходяться у вакуумі або газовому середовищі, а також для квантових точок, вирощених у скляних або широкозонних діелектриках.

Якщо квантові точки вбудовані в напівпровідникові матриці, то необхідно враховувати скінченну глибину потенціальних ям, причому вона буде різною для електронів і дірок. При цьому виникають дві проблеми. Перша з них пов'язана з тим, що на межі розділу середовищ повинна бути безперервною повна хвильова функція, яка є добутком блохівської амплітуди і повільної обвідної, а також нормальна до границі розділу складова градієнта повної хвильової функції. Проте у методі ефективної маси блохівські амплітуди явно не визначені і входять у теорію тільки через матричні елементи.

Друга проблема пов'язана з тим, що границі квантових точок є різкими, тобто відповідний ним потенціал істотно змінюється на відстані порядку сталих ґратки. Швидка зміна потенціалу може приводити до значного перемішування станів, відповідних даній зоні, і станів, що належать іншим зонам. Цей ефект не може бути задовільно описаний в рамках методу ефективної маси, який може застосовуватись лише до повільно змінних потенціалів. Врахування скінченної глибини потенціальних ям і різкої границі розділу середовищ можливе лише у результаті складних чисельних розрахунків.

Подальше уточнення енергетичного спектру електронної підсистеми квантових точок пов'язане з відмовою від двозонної моделі напівпровідника. Дійсно, валентна зона напівпровідникових матеріалах з різною симетрією має складну структуру, тобто складається з підзон важких, легких і спин-орбітальних відщеплених дірок. Врахування цієї важливої обставини можливе з використанням багатозонних моделей, заснованих на k - p -теорії збурень. У простому варіанті такої моделі підзони валентної зони вважаються незалежними один від одного. У такому разі енергетичний спектр електронних і екситонних станів квантових точок буде суперпозицією спектрів ізольованих зон. В рамках такої моделі можна отримати аналітичні результати, необхідні для якісної оцінки впливу конфайнмента на властивості низькорозмірних систем. Адекватніший опис зонного спектру

електронної підсистеми квантових точок шляхом послідовного врахування *k-p*-збурень, що змішують різні зони або підзони валентної зони, вимагає громіздких чисельних розрахунків власних енергій і власних функцій.

Окрім режимів, що обговорювалися, сильного і слабого конфайнмента безперечний інтерес має проміжний випадок, коли характерний розмір наноструктури сумірний з радіусом екситона. У режимі проміжного просторового обмеження (конфайнмента) при визначенні енергетичного спектру квантових точок необхідно враховувати екситонні ефекти, причому просторове обмеження істотно впливає як на трансляційний рух, так і на відносний рух екситону. Очевидно, що задача на власні значення і власні функції в режимі проміжного конфайнмента може бути розв'язана лише чисельними методами навіть у рамках двозонної моделі напівпровідника і в припущенні нескінченно високих потенціальних бар'єрів.

Енергетичний спектр і хвильові функції електронної підсистеми квантових точок розраховувалися і іншими методами. Необхідно враховувати також важливі аспекти тонкої структури енергетичного спектру електронів, дірок і екситонів у квантових точках, пов'язані із спін-орбітальною і обмінною взаємодіями.

3.3. Фононна підсистема квантових точок

Тривимірне просторове обмеження модифікує не тільки електронні стани квантової точки, але і коливання її ґратки, тобто акустичні і оптичні фонони (рис.3.6). Розгляд цієї проблеми можливий [3.1] на прикладі ізолюваного нанокристала, вважаючи, що він має вільну або жорстко закріплену границю. В цьому випадку коливання ґратки квантової точки не взаємодіють з її навколишнім середовищем. Для опису фононного спектру нанокристал може представлятися моделлю ізотропного пружного континууму, в рамках якої вдається отримати ряд корисних аналітичних результатів, які якісно характеризують і більш реалістичні з фізичної точки зору системи. *Акустичні фонони.* Розгляд почнемо з акустичних фононів, що є звуковими хвилями. Для їх опису можна використовувати спрощену модель, у якій напівпровідниковий кристал замінюється ізотропним пружним континіумом, тобто не враховується атомарна структура твердих тіл. Амплітуди коливань u ізотропного пружного континіуму описуються наступним добре відомим векторним рівнянням:

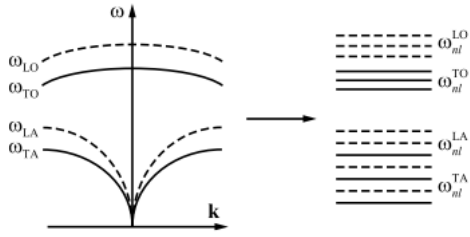


Рис. 3.6. Перетворення неперервного енергетичного спектру подовжніх і поперечних акустичних і оптичних фононів об'ємного напівпровідника із структурою цинкової обманки у дискретний спектр коливальних станів сферичної квантової точки

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = v_{LA}^2 \text{grad div } \mathbf{u} - v_{TA}^2 \text{rotrot } \mathbf{u}$$

де $v_{LA} = \sqrt{(\lambda + 2\mu)/\rho}$ і $v_{TA} = \sqrt{\mu/\rho}$ — швидкості подовжніх і поперечних хвиль, ρ — питома густина речовини, а λ і μ — пружні сталі.

У припущення *сферичної форми* ізолюваної квантової точки і вільної границі нанокристалу можна показати, що можуть виникати поперечні і подовжньо-поперечні коливання. Це приводить до

розмірного квантування енергетичного спектру акустичних фононів. Аналіз задачі про акустичні фонони для наведених вище припущень показує, що значення їх енергій, на відміну від енергій електронів, дірок і екситонів, залежать від розміру нанокристалу як $1/R$, де R — радіус квантової точки.

Оптичні фонони. Розглянемо тепер оптичні фонони в ізолюваній квантовій точці з полярного напівпровідника з двома атомами в елементарній комірниці. Як і раніше, користуватимемося моделлю ізотропного пружного континууму. Проте на відміну від задачі про акустичні фонони, величина \mathbf{u} тепер має сенс зсуву позитивного іона відносно негативного. Оскільки в іонних матеріалах подовжні оптичні коливання ґратки приводять до появи електричного поля $\mathbf{E} = -\text{grad } \phi^{\text{оп}}$, то для розв'язку задачі про оптичні фонони необхідно використовувати рівняння Максвелла. Надалі можна нехтувати запізнюванням електромагнітних полів і, отже, можна обмежитися одним з цих рівнянь для вектора електричної індукції \mathbf{D} , залежного від \mathbf{E} і \mathbf{u} : $\text{div } \mathbf{D} = 0$, яке доповнює феноменологічне рівняння для \mathbf{u} :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = -\omega_{\text{TO}}^2 \mathbf{u} - \beta_{\text{LO}}^2 \text{grad div } \mathbf{u} + \beta_{\text{TO}}^2 \text{rotrot } \mathbf{u} + \frac{\alpha}{\rho} \mathbf{E},$$

де ω_{TO} — частота поперечного оптичного фонона в об'ємному матеріалі в центрі зони Бріллюена при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$; β_{LO} і β_{TO} — параметри, що характеризують кривизну дисперсійних кривих оптичних фононів в об'ємному матеріалі; $\alpha = \omega_{\text{TO}} \sqrt{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty) \rho / 4\pi}$; ϵ_0 і ϵ_∞ — відповідно низько- і височастотна

діелектрична проникність напівпровідника; ρ – густина позитивних і негативних іонів.

Як і у разі акустичних фононів, для оптичних фононів має місце ефект розмірного квантування. Так, наприклад, у разі квантових точок з жорстко закріпленою поверхнею частоти чисто поперечних оптичних коливань мають значення:

$$\omega_{nl}^{\text{TO}} = \sqrt{\omega_{\text{TO}}^2 - \frac{\beta_{\text{TO}}^2 \xi_{nl}^2}{R^2}},$$

а для чисто подовжніх коливань ($l = 0$)

$$\omega_{n0}^{\text{LO}} = \sqrt{\omega_{\text{LO}}^2 - \frac{\beta_{\text{LO}}^2 \xi_{nl}^2}{R^2}},$$

де $\omega_{\text{LO}} = \sqrt{\omega_{\text{TO}}^2 + 4\pi\alpha^2 / \varepsilon_{\infty}\rho}$ — частота подовжнього оптичного фонона в об'ємному матеріалі в центрі зони Бріллюена.

Слід відзначити, що модель ізольованої квантової точки може застосовуватися лише для обмеженого числа реальних систем. Дійсно, ізольованими є нанокристали у вакуумі, які мають вільну поверхню. Менш обґрунтовано використання такої моделі для опису квантових точок в газових і рідких середовищах. Якщо нанокристали знаходяться в твердотільній матриці, то уявлення про ізольовану квантову точку, принаймні відносно акустичних коливань втрачає сенс. Контакт нанокристалу з діелектричною або напівпровідниковою матрицею приводить до того, що акустичні фонони матеріалів з квантовими точками є єдиною підсистемою для точок і матриці. Ефект розмірного квантування для таких акустичних хвиль відсутній.

Для опису оптичних коливань модель ізольованої квантової точки має ширшу область застосовності, ніж для опису акустичних фононів. Це пов'язано з тим, що не всі твердотільні матеріали, що використовуються як матриці, мають оптичні коливання ґраток. До них, у першу чергу, відносяться різноманітні види скла і кристали з одним атомом в елементарній комірі. Крім того, якщо закони дисперсії оптичних фононів у матеріалах, з яких виготовлені нанокристали і матриця, не перекриваються, то модель ізольованої квантової точки може бути використана для опису оптичних коливань нанокристалу. Інакше, коли таке перекриття має місце, необхідно використовувати уявлення про єдину систему оптичних фононів для всього макроскопічного зразка. У такому разі, як і для акустичних фононів, для оптичних коливань ефект розмірного квантування відсутній.

Електрон-фононна взаємодія у квантових точках. Як згадувалося раніше, тривимірне просторове обмеження елементарних збуджень квантової точки приводить не тільки до ефекту розмірного квантування їх енергетичного спектру, але і до модифікації взаємодії збуджень одне з одним. Зокрема, істотно змінюється зв'язок між електронною і коливальною підсистемами, який грає важливу роль у багатьох фізичних процесах.

Вивчення електрон-фононної взаємодії у квантових точках почалося практично одночасно з дослідженням їх електронної структури. Аналізу впливу тривимірного конфайнмента на електрон-коливальний зв'язок у таких квазінульвимірних об'єктах присвячене велике число експериментальних і теоретичних робіт. Оскільки квантова точка зберігає властивості кристалів, то для її опису найбільш продуктивним є підхід, заснований на методах фізики об'ємних твердих тіл. У його межах вдається виділити основні особливості електрон-фононної взаємодії, характерні для квантових точок. Розглянемо різні типи взаємодії електронної і коливальної підсистем.

Деформаційна взаємодія з акустичними фононами.

Коли кристалічна гратка деформується, електронні і екситонні енергії змінюються. Якщо деформація мала і однорідна, то зміни енергій будуть пропорційні компонентам тензора деформації

$$u_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j(\mathbf{r})}{\partial x_i} \right),$$

де $i, j = 1, 2, 3$, а компоненти x_1, x_2, x_3 відповідають декартовим координатам x, y, z . Саме ці додаткові доданки, що виникають у гамільтоніані електронної підсистеми кристала завдяки його деформації, описують електрон-фононну взаємодію.

У більшості випадків головний внесок у потенціальну енергію взаємодії фононів з електронами, дірками і екситонами можна представити як

$$V_{\text{def}}^{\text{ac}} = D^{\text{ac}} \sum_i u_{ii}(\mathbf{r}) = D^{\text{ac}} \text{div } \mathbf{u}(\mathbf{r}).$$

Коефіцієнт пропорційності D^{ac} є деформаційним потенціалом, причому його значення залежить від того, до яких саме енергетичних зон належать електрони і дірки.

Оцінки показують [3.1], що деформаційна взаємодія електронної підсистеми «сферичної» квантової точки з акустичними фононами залежить від її радіусу R як $1/R^2$.

П'єзоелектрична взаємодія. У ряді напівпровідників деформація ґратки, обумовлена акустичними коливаннями, супроводжується виникненням електричної поляризації, яка впливає на заряджені частинки. Так здійснюється п'єзоелектрична взаємодія між електронною підсистемою квантової точки і акустичними фононами. У разі «сферичної» квантової точки (за умови однорідної акустичної деформації) важливо відзначити, що на відміну від деформаційної взаємодії п'єзоелектрична взаємодія залежить від радіусу квантової точки як $1/R$.

Деформаційна взаємодія з оптичними фононами. Наступним типом електрон-фононної взаємодії у квантових точках є зв'язок їх електронної підсистеми з оптичними фононами через деформаційний потенціал. Однорідна оптична деформація кристала з двома атомами в елементарній комірці описується вектором $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_1(\mathbf{r}) - \mathbf{u}_2(\mathbf{r})$, що задає відносний зсув цих атомів. Відповідна потенціальна енергія носіїв заряду у деформаційному потенціалі оптичних фононів може бути представлена у вигляді скалярного добутку

$$V_{\text{def}}^{\text{оп}}(\mathbf{r}) = \sum_i D_i^{\text{оп}} u_i(\mathbf{r}),$$

$D_i^{\text{оп}}$ – константи деформаційного потенціалу оптичних фононів.

З останнього виразу видно, що для такої взаємодії у кристалі повинен існувати матеріальний вектор $\mathbf{D}^{\text{оп}}$. У кубічних напівпровідниках для невідроджених електронних (діркових) енергетичних зон з екстремумами у центрі зони Бріллюена напрямок вектора $\mathbf{D}^{\text{оп}}$ невизначений, і деформаційна взаємодія з оптичними фононами відсутня. Прикладом може бути ситуація в зоні провідності GaAs і у верхній валентній зоні CuCl. В той же час для складних зон, таких як чотирикратно вироджені валентні зони Si, Ge і GaAs, деформаційна взаємодія з оптичними фононами відмінна від нуля.

Полярна взаємодія з оптичними фононами. Самим вивченим типом зв'язку електронної і коливальної підсистем квантових точок є полярна взаємодія з оптичними фононами. Особливий інтерес до зв'язку цього типу визначається тим, що більшість квантових точок, що досліджувалися, були виготовлені з матеріалів з достатньо високим ступенем іонності. Як згадувалося, подовжні оптичні коливання ґраток таких матеріалів супроводжуються електричним полем. Дія цього поля на заряджені частинки і приводить до полярної електрон-фононної взаємодії. У разі квантових точок електричне поле індукується не тільки чисто

подовжніми фононами, але і коливаннями змішаного типу. Потенціальна енергія електронів і дірок у цьому полі має наступний вигляд:

$$V_{\text{def}}^{\text{оп}}(\mathbf{r}) = -e\varphi^{\text{оп}}(\mathbf{r}),$$

де електричний потенціал $\varphi^{\text{оп}}(\mathbf{r})$ можна отримати у результаті розв'язку задачі про власні оптичні коливання.

У ранніх роботах, присвячених полярній електрон-фононній взаємодії в нанокристалах, потенціал $\varphi^{\text{оп}}(\mathbf{r})$ був обчислений для квантових точок сферичної форми. Використовувалася спрощена модель оптичних коливань ґраток, у рамках яких нехтували просторовою дисперсією фононів. В цьому випадку змішані оптичні моди не виникають і в квантових точках існують чисто подовжні і чисто поверхневі оптичні фонони, що індують електричні поля.

Ефект розмірного квантування і модифікація взаємодій елементарних збуджень одне з одним приводять до того, що у квантових точках порівняно з об'ємними матеріалами істотно змінюються механізми енергетичної і фазової релаксації і, отже, швидкості внутрішньо зонних переходів.

Процеси внутрішньо зонної релаксації носіїв заряду у квантових точках радикальним чином відрізняються від аналогічних процесів у структурах з вищою розмірністю – квантових нитках і ямах, а також в об'ємних напівпровідниках. Зокрема, ті чи інші механізми релаксації у квантових точках можуть виявлятися у залежності від умов проведення експерименту (температури, наявності струму через гетероструктуру і т. д.), режиму конфайнмента, числа носіїв заряду, а також структури фононного спектру і сили електрон-фононної взаємодії.

Взаємодія електронної підсистеми квантових точок з акустичними фононами ослаблена у порівнянні з аналогічною взаємодією в об'ємних матеріалах; швидкість релаксації зі збудженням акустичних фононів у квантовій точці на багато порядків менше, ніж в об'ємному матеріалі. Таким чином, збуджені носії заряду квантової точки можуть потрапити до основного стану «звичайним» способом і вимушені залишатися на більш високоенергетичних рівнях. Описаний ефект уповільнення релаксаційних процесів у квантових точках отримав назву «фононне темно-зелене горло» (*phonon bottleneck*).

Слід зазначити, що це уповільнення швидкості релаксації в квантових точках має місце при зменшенні їх розміру. Основною причиною, за якої релаксація сповільнюється із зменшенням розміру квантової точки, може

бути неможливість одночасно задовольнити законам збереження енергії і імпульсу в процесі розсіяння електрона на акустичному фононі.

Порогове значення хвильового вектора дозволяє оцінити енергетичну відстань між електронними рівнями, за якої настає уповільнення релаксації зі збудженням подовжніх акустичних фононів. Для звичайних матеріалів і квантових точок висотою $L_z = 10$ нм це значення складає 1–2 меВ.

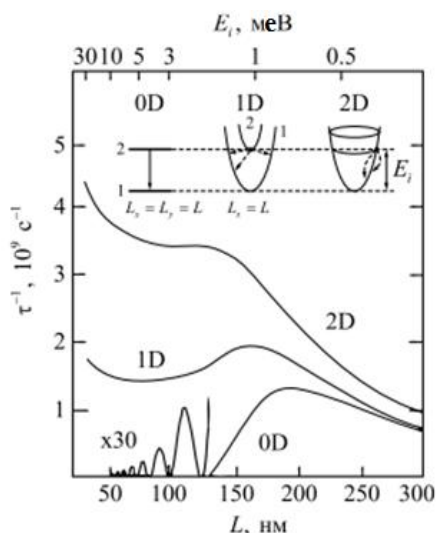


Рис. 3.7. Швидкість збудження ЛА-фононів у нульвимірному (0D), одновимірному (1D) і двовимірному (2D) електронних газах. Нижня вісь позначає розмір квантової точки ($L_x = L_y = L_z = L$) і визначає початкову енергію електрона E_i (верхня вісь), $T = 4$ К.

взаємодії електронної підсистеми квантових точок з елементарними збудженнями, локалізованими в областях, віддалених від квантових точок на відстані в декілька десятків нанометрів. Ці взаємодії можуть служити фізичною основою цілого ряду механізмів релаксації, які можна визначити як «далекодійні».

Особливу важливість «далекодійні» механізми релаксації набувають у зв'язку з радикальною мініатюризацією елементної бази наноелектроніки. Перспектива створення складних інтегральних наносхем, елементами яких можуть служити одноелектронні транзистори, логічні елементи і елементи пам'яті на основі квантових точок, ставить питання про гранично допустиму щільність упаковки таких пристроїв. Ясно, що максимальна щільність визначається найменшою відстанню між елементами схеми, на якому їх взаємним впливом ще можна нехтувати. Розміри самих наноелектронних пристроїв, що є, як правило, складними гетероструктурами, також обмежені

Як видно з рис. 3.7, істотне уповільнення релаксації починається для квантових точок, розмір яких менший за 130 нм. Для порівняння на тому ж рисунку наведені результати розрахунку швидкості релаксації електронів з першої підзони в основну у квантовій нитці (1D) і квантовій ямі (2D). Видно, що за енергій $E_i > 2$ меВ швидкість релаксації зі збудженням ЛА-фононів у двовимірному і одновимірному електронному газі більш ніж на порядок перевищує швидкість релаксації електронів у квантовій точці.

«Далекодійні» механізми релаксації. Останнім часом все більший інтерес викликає проблема

знизу взаємодією їх активних елементів один з одним. Ці взаємодії приводять до «далекодійючих» механізмів релаксації, дослідження яких необхідне для визначення способів контролю (посилення або ослаблення) зв'язку між елементами пристроїв.

Для виникнення у гетероструктурі релаксації за допомогою «далекодійючого» механізму потрібно, щоб елементарне збудження її частини (наприклад, фонон підкладинки або плазмон металевого контакту) породжувало електричне поле. Це поле проникає у суміжні з даною частиною області, де слабшає експоненціально, і здійснює зв'язок між областю локалізації збудження й іншими областями гетероструктури. Завдяки наявності такого зв'язку збуджені носії заряду гетероструктури, що знаходяться в одній частині, можуть спонтанно релаксувати, породжуючи елементарне збудження в іншій. За фіксованої відстані між елементами гетероструктури ефективність будь-якого «далекодійючого» механізму релаксації визначається глибиною проникнення породжуваного елементарним збудженням електричного поля у ту чи іншу область гетероструктури. Цю глибину можна характеризувати дією даного поля на зонд, положення якого усередині гетероструктури варіюється. Якщо як зонд використовувати напівпровідникову квантову точку, то про ефективність проникнення електричного поля у місце розташування зонда найприродніше судити за швидкістю внутрішньозонної релаксації електронної підсистеми квантової точки.

Поверхневі фонони. Канал релаксації може також виникати через взаємодію квантової точки з електричними полями, індукованими поверхневими фонами. Цими фонами є коливання атомів, що розповсюджуються уздовж меж розділу однорідних частин гетероструктур не проникаючи глибоко в об'єм.

Таким чином, підводячи підсумок щодо впливу «далекодійючих» механізмів релаксації можна зробити наступний висновок.

Електричні поля, що індукуються об'ємними і поверхневими ЛО-фонами, плазмонами і плазмон-ЛО-фонами, можуть вільно проникати крізь багато напівпровідникових шарів гетероструктур загальною товщиною порядку 100 нм. Взаємодія електронної підсистеми квантових точок з цими полями приводить до ефективних механізмів внутрішньозонної релаксації. Ці «далекодійючі» механізми релаксації відкривають додаткові канали енергетичних втрат у будь-яких елементах низькорозмірних систем, розмір яких сумірний з розміром квантових точок. Внаслідок цього «далекодійючі» механізми релаксації можуть грати важливу роль у роботі різних пристроїв на основі напівпровідникових наноструктур.

Контрольні запитання та вправи

- 3.1. Які типи квантових точок застосовуються у твердотільних наноприладах?
- 3.2. Дайте характеристику особливостей процесів у квантових точках різних типів.
- 3.3. Охарактеризуйте методи отримання квантових точок.
- 3.4. Опишіть ефект розмірного квантування у квантових точках.
- 3.5. У чому полягають особливості електронної підсистеми квантових точок?
- 3.6. Які рівняння і за яких припущень описують характеристики квантових точок у формі прямокутного паралелепіпеда?
- 3.7 Дайте характеристику підсистемі акустичних фононів квантових точок.
- 3.8. У чому полягають особливості підсистеми оптичних фононів квантових точок?
- 3.9. Які особливості збудження фононів у нульвимірному (0D), одновимірному (1D) і двовимірному (2D) електронних газах?

4. МОДЕЛЮВАННЯ ТРАНЗИСТОРІВ НА ОСНОВІ ГРАФЕНУ

4.1. Графенові нанострічки, їх типи та властивості

Для створення нанотранзисторів з підвищеним співвідношенням "включено/вимкнено" запропоновано графенові транзистори з використанням графенової стрічки зниженої розмірності, яку можна розглядати як квазіодновимірну систему і у який може бути відкрита енергетична щілина у графені. Дана наноструктура графена може бути використана для створення нанотранзисторів. Схему кристалічної структури стрічки графену з ідеальними краями типу "крісло" і "зігзаг" показано на рис. 4.1 [4.1]. Нанострічки на графені мають края типу "зігзаг" (zigzag) і "крісло" (armchair). У першому випадку два зв'язки вуглецю C-C кожного шестигранного періоду перпендикулярні напрямку уздовж стрічки, у другому ж — ці зв'язки паралельні вказаним напрямкам.

Після перших застосувань графенових нанострічок було зроблено висновок, що стрічки з краями типу "крісло" повинні проявляти властивості напівпровідників з величиною забороненої зони, змінною у залежності від ширини стрічки.

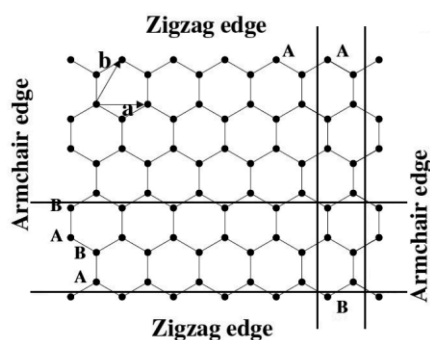


Рис. 4.1. Схема кристалічної структури листа графена

Стрічки з числом атомів вуглецю, що укладаються у напрямку поперек стрічки $n = 3p + 1$ (p - ціле позитивне число) мають більшу заборонену зону, ніж стрічки з n , рівним $3p$ або $3p + 2$. У деяких підходах було застосовано наближення сильного зв'язку з чого було отримано, що стрічки з краями типу "крісло" і $n = 3p + 2$ повинні проявляти властивості напівметалів, але все ж таки подальші розрахунки за

допомогою більш точних квантово-хімічних методів показали напівпровідниковий характер усіх стрічок з краями цього типу. Осциляції величини забороненої зони зі зміною ширини графенових стрічок

безпосередньо пов'язані з розмірним квантуванням напівметалевого графена і спостерігаються у багатьох наноструктурах на його основі.

Стрічки з краями типу "зігзаг" мають антиферромагнітні властивості і мають величину забороненої зони більше 0,1 еВ, яка монотонно зменшується з розширенням стрічки. При цьому спінова густина у стрічок повинна концентруватися переважно на краю структури. Останнє було підтверджено в експериментальних роботах: на зігзагоподібному краї графенового фрагмента спостерігався локалізований спіновий стан [4.2].

Щодо властивостей стрічок з краями типу "зігзаг", то відомо, що електронна структура у таких стрічках чутлива до типу атомів, пасивуючих краї стрічки, а також до способу їх реконструкції. Було помічено, що край стрічки "зігзаг" енергетично не самий стійкий і може бути реконструйований з втратою магнітних властивостей у так званий край типу "рекзаг" з періодичними п'яти- і семигранними комірками. Подібна реконструкція краю "зігзаг" у "рекзаг" вигідна тільки для вільно висячого графена, у той час як для поверхні металу край "зігзаг" енергетично є більш вигідним.

До теперішнього часу в експериментах отримана достатньо явна залежність величини забороненої зони від ширини графенових стрічок з невизначеними краями. На рис.4.2 представлені дані експериментів і розрахунків структур з графеновою стрічкою, проведені з використанням теорії функціонала густини, які найбільш близькі до експериментальних значень. Видно, що напівпровідникові властивості графенових нанострічок проявляються тільки до ширини ~ 10 нм, і це залишається основною перешкодою для їх застосування в електроніці.

На даний час існує декілька методів отримання графенових нанострічок. Одним із них є метод розрізання листа графена на стрічки. Для цього використовується скануючий тунельний мікроскоп з високою різницею потенціалів між вістрям мікроскопа та графеном. Розрізання графена відбувається у результаті взаємодії з ним "гострого" променя електронів, що емітують з вістря.

Для отримання графенових нанострічок перспективним є застосування інших квазіодновимірних матеріалів, які вже мають нанометровий поперечний розмір. З цією метою використовують кремнієві дроти нанометрового діаметру, нанесені на графеновий шар. Ці дроти захищають графен від впливу кисневої плазми, що дозволяє отримати нанострічки шириною від 6 нм [4.3].

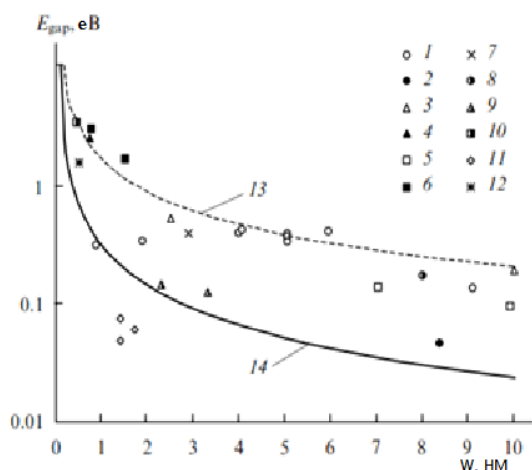


Рис. 4.2. Усереднені експериментальні значення (точки) і теоретичні оцінки (лінії) забороненої зони (E_{gap}) графенових стрічок шириною w до 10 нм

Також при нагріванні багат шарових вуглецевих нанотрубок у вакуумі до 1800 °С з них можуть бути отримані стоси графенових стрічок. Аналогічна трансформація відбувається при відпалі зразка з багат шарових вуглецевих нанотрубок (ВНТ) за високого тиску, а також при інтеркаляції (вміщення молекули, атома, іона або їх групи у проміжку між іншими) у такий зразок літію з подальшим очищенням при температурі 1000 К. Існує метод, у якому нанотрубки розрізають уздовж осі при окисненні перманганатом калію в присутності концентрованої сірчаної кислоти. У деяких роботах наводяться

способи розрізання нанотрубок внаслідок окислення при температурі 60 °С в присутності окислювача та кислоти. Пізніше було винайдено метод отримання графенових нанострічок під дією на ВНТ парів калію. Існують методи, які призводять до гідрування вуглецевих нанотрубок.

Таким чином, до теперішнього часу розроблені досить ефективні хімічні методи отримання графенових стрічок нанометрової ширини. У перспективі ці методи можуть стати основою для промислового отримання таких стрічок. Якщо буде розроблений метод контролю структури країв стрічок, то можна очікувати, що цей наноматеріал знайде широке застосування у нанoeлектроніці.

4.2. Нанотранзистори на основі графену

Польові транзистори на основі графену мають унікальні високочастотні властивості, що пов'язано насамперед із великою рухливістю носіїв заряду. Але все ж використання таких транзисторів у цифрових схемах є неможливим через низьке відношення струмів відкритого та закритого станів. Варто зауважити, що відсутність закритого стану обумовлена особливостями електронного спектру у графені [4.4].

Саме відсутність забороненої зони в одношаровому графені та малої (порядку 0,1 eV) величини забороненої зони у двошаровому графені, у вузьких смужках графену та напівпровідникових нанотрубках призводить до

малого відношення струмів відкритого та закритого станів у польових транзисторах на їх основі.

Одним із можливих розв'язків проблеми є додавання тунельного контакту у канал транзистора. Після чого провідність каналу може змінюватися варіюванням напруги на затворі, що може бути пов'язано, по-перше, із зміною прозорості тунельного бар'єру, а по-друге, завдяки зміні енергії Фермі у графені, що призводить до зміни густини станів і тунелювання електронів.

Перший запропонований тунельний транзистор на основі графену являв собою вертикальну конструкцію, яка складалася із двох паралельних листів графену (стік і витік), розділених тунельним прозорим діелектричним прошарком з нітриду бору. Висота тунельного бар'єра та концентрація електронів у контактах регулювалися нижнім затвором. Вплив затвора на провідність каналу у цьому пристрої був слабким і співставлення струмів відкритого і закритого стану досягало лише 50.

Одна із структур нанотранзисторів на основі графена запропонована у роботі [4.4]. Тунельний контакт у запропонованих варіантах транзистора являє собою контакт листа графену з діелектриком (напівпровідником). Для того, щоб забезпечити великий струм відкритого стану тунельна прозорість бар'єра повинна бути досить високою, тобто бар'єр має бути або ж вузьким, або низьким. Це означає, що робота виходу з графену у матеріал тунельного контакту повинна бути невеликою. Що ж до висоти рівня Фермі, то він визначається матеріалом тунельного контакту, і повинен бути відносно високим для діелектричних матеріалів. На границі "графен - гексагональний нітрид бору" ця висота становить 1,5 еВ для дірок і 4 еВ для електронів. Для зменшення роботи виходу як тунельний контакт можна використовувати напівпровідниковий матеріал. У такому випадку висота бар'єру приблизно дорівнюватиме половині ширини забороненої зони напівпровідника.

Дві запропоновані у даній роботі конструкції тунельних польових транзисторів з графеновими каналами схематично зображені на рис.4.3. в поперечному розрізі.

На рисунку 4.3, *a* кремнієва вставка шириною L розміщена у центрі каналу, а лист графену оточений діелектриком. Для забезпечення високої рухливості і малого наведеного заряду у каналі може бути використаний гексагональний нітрид бору. Провідність каналу управляється верхнім затвором, що знаходиться на відстані d від листа графена.

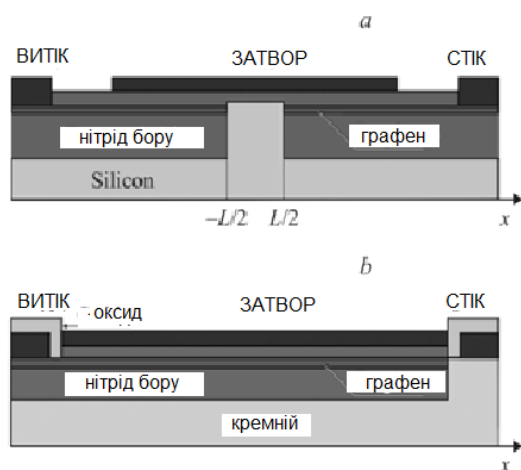


Рис. 4.3. Схематичне зображення пропонувананих транзисторних структур: *a*- тунельний контакт всередині каналу; *b*- тунельний контакт біля стоку

На рисунку 4.3, *b* кремнієвий тунельний контакт розташований біля стоку, причому контакти стоку і затвору розділені діелектричним спейсером, який може бути сформований, наприклад, при окисненні металевого електрода. Структура може керуватися як верхнім, так і нижнім затвором.

У даній роботі наведено зонні діаграми (рис.4.4) та вольт-амперні характеристики (рис. 4.5, рис.4.6) для запропонованих структур.

На рисунку 4.4, *a* показані зонні діаграми для транзистора на основі графену з тунельним контактом усередині каналу (L є набагато більшим

від d) за нульової стокової напруги (зверху) і додатної стокової напруги на стоці V_D . Хрестиком показано положення діраківської точки.

На рис. 4.4, *б* показані зонні діаграми для транзистора на основі графену з тунельним контактом біля стоку за нульової напруги стоку (зверху) і додатної напруги стоку V_D .

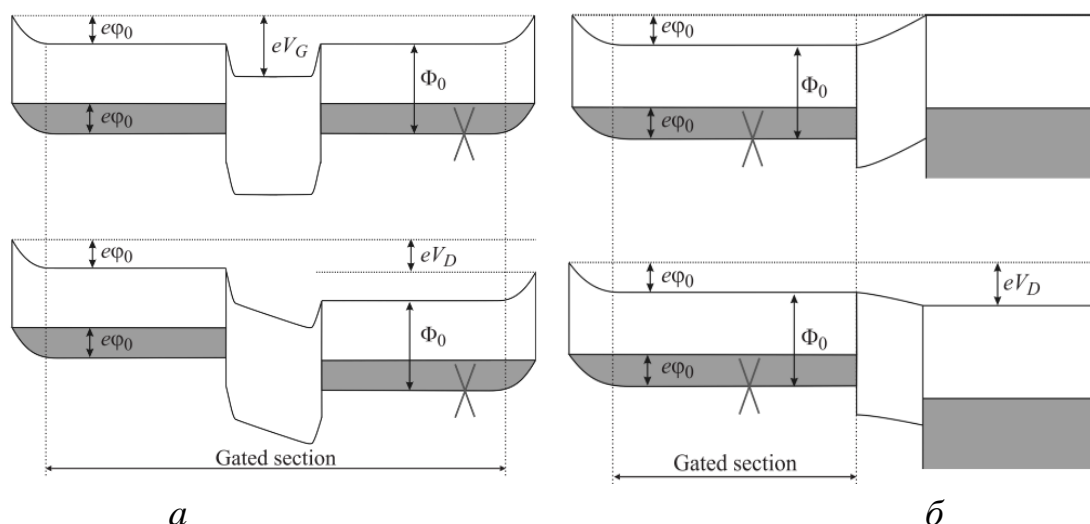


Рис. 4.4. Зонні діаграми для запропонованих моделей транзисторів на основі графену: *a*- тунельний контакт всередині каналу; *б*- тунельний контакт біля стоку

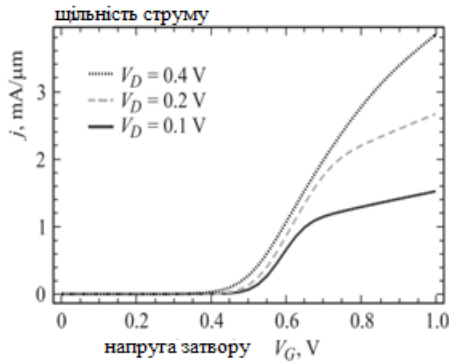


Рис. 4.5. Залежність густини струму від напруги на затворі для транзистора з тунельним контактом всередині каналу. Ширина бар'єра 5 нм, товщина підзатворного діелектрика $d = 1$ нм, температура $T = 300$ К

Результати моделювання залежностей густини струму від напруги для транзистора з тунельним контактом всередині каналу і шириною бар'єру 5 нм показано на рис.4.5 і 4.6. На рис.4.7 показано схематичне зображення поперечного перерізу польового транзистора для моделювання.

Для розрахунку струму у запропонованій структурі нанотранзистора використано формулу:

$$j = -\frac{1}{L} \int_0^{V_D} G(\gamma) d\gamma.$$

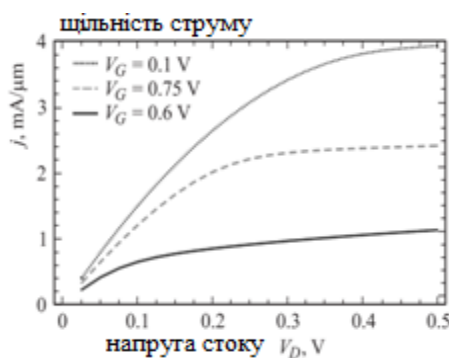


Рис. 4.6. Залежність густини струму від напруги стоку для транзистора з тунельним контактом всередині каналу. Ширина бар'єра 5 нм, товщина підзатворного діелектрика $d = 1$ нм, температура $T = 300$ К

У роботі [4.5] розглянуто моделі польових транзисторів на основі одношарового і двошарового графену і виявлено, що більшість робіт з транспорту у одношаровому графені ігнорують факт сильної міжчастинкової взаємодії, що зберігається навіть за енергії Фермі вдалині від діраківської точки. Також показано, що існуючі моделі транспорту у двошаровому графені не враховують особливостей електронного спектру, які можуть вплинути на характеристики польових транзисторів у балістичному режимі, особливо за низьких температур.

Розраховано залежності $j(V_D)$ та $j(V_G)$, з яких були отримані сімейства вольт-амперних характеристик для запропонованої моделі нанотранзистора, дані сімейства показані на рис.4.8. Наведені результати підтверджують переваги транзисторів на основі графену над транзисторами на основі інших матеріалів.

На рисунку 4.8 наведено дані для структури з довжиною каналу 1 мкм, товщиною підзатворного діелектрика 10 нм, домінуючий механізм розсіювання - акустичні фонони.

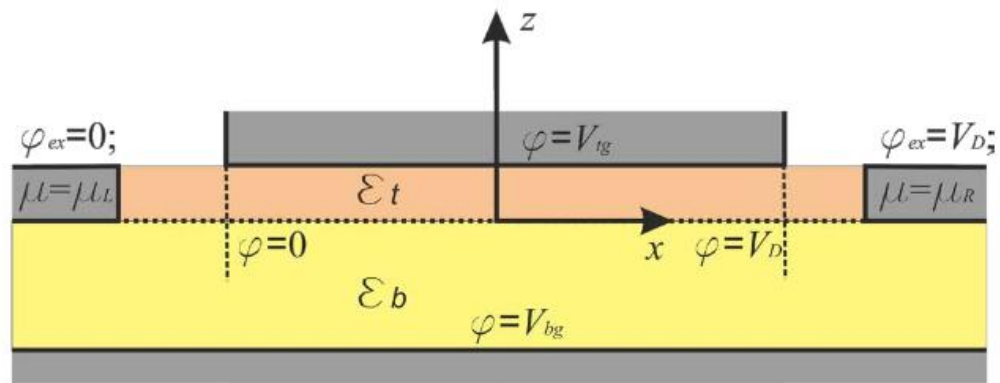


Рис. 4.7. Схематичне зображення поперечного перерізу польового транзистора для моделювання з поясненням граничних умов для рівнянь гідродинаміки і рівняння Пуассона

У роботі [4.6] наведено приклад моделювання тунельного польового транзистора на квантовій ямі, утвореній трьома шарами похідних графена $(\text{COH})_n$ – $(\text{CF})_n$ – $(\text{CH})_n$ і стоком з шаром – $(\text{CF})_n$. Наведено квантово-хімічний розрахунок широкозонних 2D напівпровідників та можливості створення нанотранзисторів на їх основі. Найпростіша зонна діаграма, що описує двобар'єрну структуру транзистора, побудована з розрахованих у даній роботі похідних графена, зображена на Рис. 4.8.

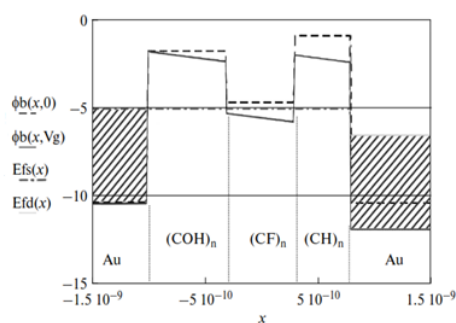


Рис. 4.8. Спрощена зонна діаграма двобар'єрної тунельної структури

Дана структура побудована з трьох шарів широкозонних 2D напівпровідників - похідних графена: пергідрокси графену $(\text{COH})_n$, флюорографену $(\text{CF})_n$ і графану – $(\text{CH})_n$, до яких з боків прилягають дві золоті платівки із дном зони провідності на рівні -10,5 еВ і рівнем хімічного потенціалу -5,1 еВ. Штрихова лінія $\Phi_b(x,0)$ - дно спільної зони провідності у відсутності потенціалу зміщення, суцільна тонка ламана лінія $\Phi_b(x,V_g)$ - дно зони провідності за потенціалу зміщення $V_g = 0,6$ В. Товста суцільна лінія $E_{fd}(x)$ - рівень Фермі золота в правому електроді при підключенні електричної напруги.

У роботі [4.6] наведено формулу для розрахунку густини тунельних струмів транзистора, коефіцієнтів прозорості квантових бар'єрів; густини електронного струму крізь двобар'єрну структуру; максимального струму вздовж квантової ями; електронної квантової ємності.

4.3. Моделювання нанотранзистора на основі графену з горизонтальною структурою

Досліджено дві структури нанотранзисторів на основі стрічки графену. Використана аналітична модель, що враховує крайові ефекти графенових нанострічок типу «крісло» («ємнісна модель») та аналітична модель польового транзистора з графеновою нанострічкою з апроксимацією залежностей потенціалів на бар'єрах.

На відміну від вуглецевих нанотрубок, які не мають краю, існування ребер у нанострічках графену типу «крісло» істотно впливає на квантові ємності та балістичні характеристики нанотранзисторів. На рис.4.9 показана графенова нанострічка типу «крісло», яка була використана для дослідження і аналізу математичної моделі [4.6]. На схематичному зображенні нанострічки графену показано, що край гексагональної ґратки обмежений воднем (білі круги з обох боків ґратки). Крайові зв'язки мають різну довжину зв'язку і параметри зв'язку для тих атомів, які знаходяться у середині нанострічки внаслідок крайових ефектів.

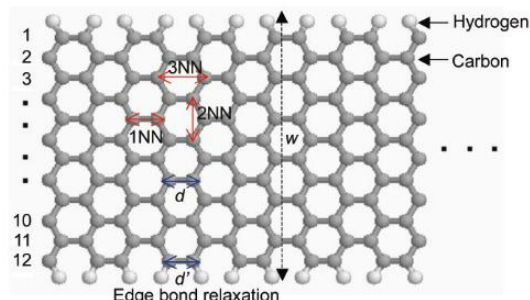


Рис. 4.9 — Схематичне зображення краю нанострічки графену типу «крісло»

Всі атоми взаємодіють між собою, що додає щільності нанострічці, це також показано на рисунку: 1NN – взаємодія між першими найближчими сусідніми атомами; 2NN – взаємодія між іншими сусідніми атомами, які хоч і мають більшу відстань між собою, ніж перші, але все ж сильно взаємодіють між собою; 3NN – взаємодія між третіми атомами, які мають найбільшу відстань між собою, порівняно із першими та

другими, але все ж мають міцну взаємодію між собою.

На рис. 4.10 показана ємнісна модель нанотранзистора на основі графену, яка досліджувалась у даному розділі. На рис.4.10, *a* показано енергетичний профіль $E(x)$, також показано рівень Фермі без (суцільна червона лінія) та із урахуванням напруги V_d (штрихова синя лінія). На рис. 4.10, *b* зображена модель ємностей для обчислення потенціалу у верхній частині бар'єру, де C_{ins} – ємність діелектрику, C_s – ємність витоку, C_d – ємність стоку, V_d – напруга стоку, V_g – напруга на затворі.

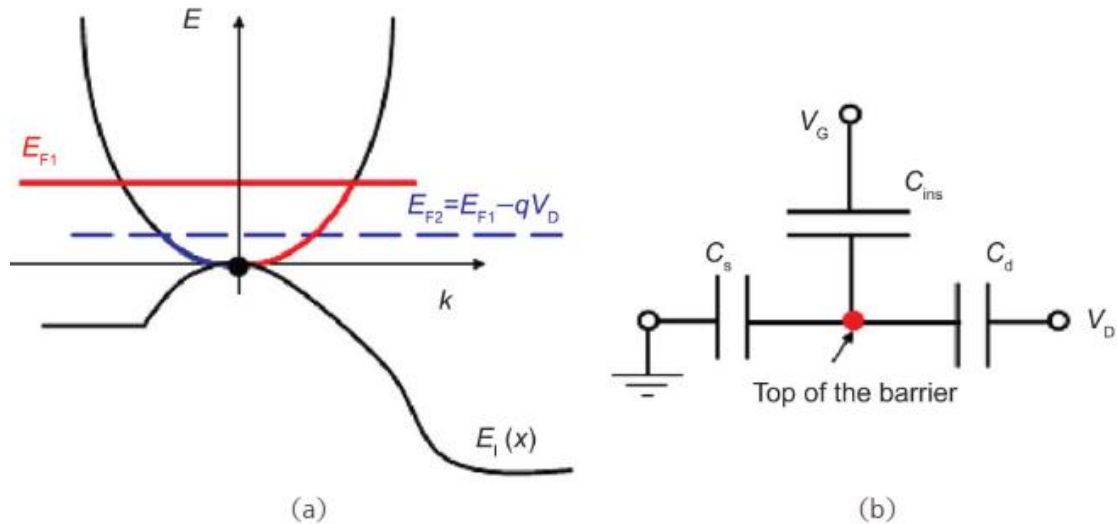


Рис. 4.10. Ємнісна модель нанотранзистора

Планарна структура польового транзистора на основі графенової стрічки для моделювання показана рис. 4.11. Електронний канал формується у графеновій нанострічці між омичним стоком і витокom з підключенням додатної напруги до нижнього затвору. Верхній затвор контролює струм стоку шляхом формування енергетичного бар'єру для електронів, що рухаються між витокom та стоком. Додатна напруга нижнього затвору є досить великою, щоб викликати необхідну щільність електронів у секції між витокom і стоком. Прийнято позначення: напруга бар'єру – V_b , напруга затвору – V_g , напруга стоку – V_d , товщина шару між графеновою нанострічкою та нижнім затвором – W_b , товщина шару між графеновою нанострічкою та верхнім затвором – W_g та довжина верхнього затвору – L_g .

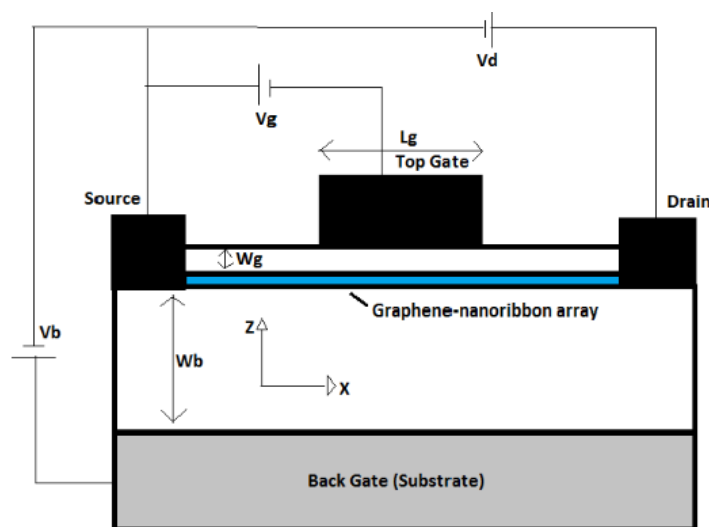


Рис. 4.11. Структура нанотранзистора з системою нанострічок

На рис. 4.12 зображено багатоканальну структуру транзистора на основі системи графенових нанострічок для підвищення вихідної потужності.

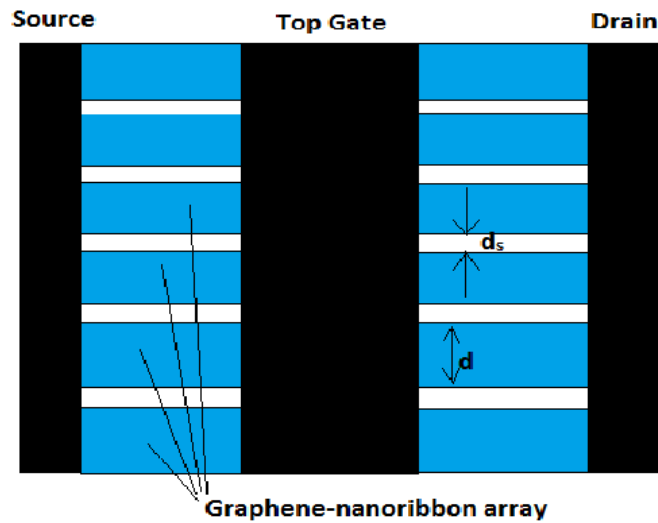


Рис. 4.12. Схематичний вигляд зверху конструкції нанотранзистора

Даний польовий нанотранзистор виготовлено з шаром графену, який утворює щільний масив паралельних нанострічок з шириною d і відстанями між нанострічками d_s так що $d_s \ll d$. Нижній затвор, у свою чергу, є провідною підкладинкою [4.7].

4.4. Порівняльний аналіз моделей транзистора на основі графену

Розглянемо два підходи (дві математичні моделі) розрахунку вольт-амперних характеристик графенових транзисторів.

Для першої моделі виходячи із закону дисперсії можна записати [4.6] рівняння для розрахунку густини струму нанотранзистора на основі графенової стрічки:

$$I = \frac{2ek_B T}{h} \left[\ln \left(1 + e^{\frac{E_F - E_{top}}{k_B T}} \right) - \ln \left(1 + e^{\frac{E_F - E_{top} - eV_D}{k_B T}} \right) \right],$$

де e – заряд електрона; k_B – стала Больцмана; T – температура; h – стала Планка; E_F – енергія Фермі; E_{top} – енергія носіїв заряду у графеновій стрічці з урахуванням ємностей; V_D – напруга стоку.

Для знаходження E_{top} було отримано формулу із рівняння електростатики [4.8], яка має вигляд:

$$E_{top} = -e \frac{C_{ins} V_G + C_d V_D - eN}{C_{ins} + C_s + C_d},$$

де C_{ins} – ємність діелектрика; C_s – ємність витоків; C_d – ємність стоку; V_D – напруга стоку; V_G – напруга на затворі.

Величина E_{top} була отримана з формули для знаходження кількості носіїв:

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} 0,5(D(E - E_{top} - \Delta / 2)f(E - E_F) + D(E - E_{top} - \Delta / 2)f(E - E_F - eV_D))dE,$$

де функція $D(E)$ – густина енергетичних станів; функція $f(E)$ – ймовірність заселення рівня із енергією E електрона (функція розподілу Фермі); E_F – енергія Фермі; значення $\Delta/2$ знаходиться із закону дисперсії для графена $E(k)$ [4.9]:

$$E(k) = \sqrt{(\Delta / 2)^2 + (\hbar v_s k)^2},$$

де:

$$\frac{\Delta}{2} = y_1(2s \cos \frac{p\pi}{m+1} + 1) + y_3(2s \cos \frac{2p\pi}{m+1} + 1) + \frac{4(y_3 + \Delta y_1)}{m+1} \sin^2 \frac{2p\pi}{m+1},$$

де p, m, s – сталі стрічки графену, які залежать від її розміру та властивостей; y_1 стала величина для графена -3,2 еВ; y_3 – стала величина для графену, котра дорівнює -0,3 еВ; Δy_1 також є сталою величиною для графена, яка дорівнює -0,2 еВ.

Густина енергетичних станів може бути знайдена за такою формулою [4.8]:

$$D(E) = \frac{4\pi}{h^3} (m_n)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}},$$

де h – стала Планка; m_n – маса електрона.

Для розрахунку густини станів у запропонованій математичній моделі використано апроксимації [4.8], які враховують ширину графенової стрічки та доповнюють рівняння ємнісної моделі:

$$D(E) = \frac{4\pi}{3a|t|\pi} \cdot \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - (E_G / 2)^2}} \cdot \theta(E - E_G / 2),$$

де $E_G = 0,4\pi/W$, W – ширина нанострічки; $t = 3$ еВ, θ – функція Хевісайда.

Функція ймовірності заселення енергетичних рівнів знаходиться відповідно до статистики Фермі-Дірака:

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1},$$

де k_B – стала Больцмана; T – температура; E_F – енергія Фермі.

Друга математична модель нанотранзистора включала диференціальне рівняння, що регулює розподіл потенціалів, на основі якого було виведено формулу для розрахунку густини струму [4.7]:

$$F = \exp(\sinh^{-1}(\beta\gamma V_b)) \exp\left(-\beta\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + (e|\phi_m|)^2}\right) - \\ - \exp(\sinh^{-1}(\beta\gamma(V_b - V_d))) \exp\left(-\beta\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + (e(|\phi_m| + V_d))^2}\right) \\ J = \alpha \exp(\beta e \phi_m) F,$$

де V_b – напруга бар'єру, V_d – напруга стоку;

$$\alpha = \frac{2ek_B T}{\pi \hbar d}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}; \quad \gamma = \frac{\varepsilon \hbar d v}{32eW_b}.$$

У даному виразі ϕ_m є мінімальним значенням електричного потенціалу, який знаходиться для $x = 0$ і описується рівнянням [4.10]:

$$\phi = V_d \frac{\sinh(AL_g/2)}{\sinh(AL_g)} + V_g \frac{1}{A^2} \left(-\frac{3}{W_b W_g + W_g^2} \right) \left(\frac{1}{\cosh(AL_g/2)} - 1 \right).$$

У цьому виразі:

$$A = \sqrt{B + C\sqrt{1 + DV_b^2}}; \quad B = \frac{3}{W_b W_g}; \\ C = \frac{96e^2}{dv\varepsilon\hbar(W_b + W_g)}; \quad D = \frac{\varepsilon^2 \hbar^2 d^2 v^2}{1024e^2 T^2 k_B^2 W_b^2};$$

де L_g – довжина верхнього затвору, W_b – товщина шару між нанострічкою і нижнім затвором, W_g – товщина шару між нанострічкою і верхнім затвором.

На основі наведених вище рівнянь та апроксимацій досліджено вольт-амперні характеристики транзисторів з каналом у вигляді графенової стрічки планарної структури. Також було досліджено вплив різних параметрів транзистора на вихідні вольт-амперні характеристики нанотранзисторів.

Результати розрахунку за «ємнісною» моделлю сімейства вихідних вольт-амперних характеристик показані на рис. 4.13.

Сімейство вхідних вольт-амперних характеристик складається із п'яти кривих, кожна з яких розрахована для заданої напруги стоку. Початкове значення напруги стоку - синя лінія (становить 1 В). Напруга стоку при розрахунку вольт-амперної характеристики змінювалася із кроком 0,2 В, таким чином максимального значення вона сягнула для напруги стоку 1,8 В (верхня крива на графіку). Зі зміною напруги стоку криві на ділянці насичення струму змінюються несуттєво, а криві розташовані майже еквідистантно за вибраних значень напруги на затворі.

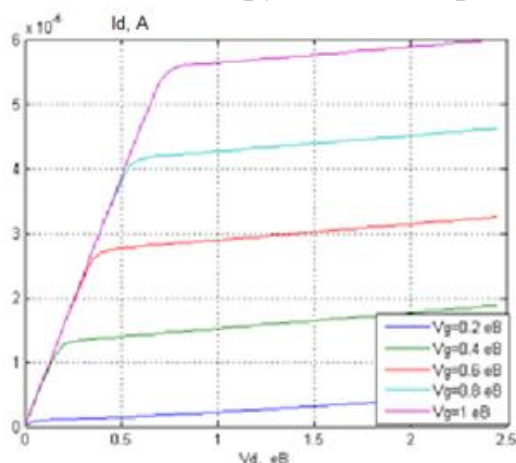


Рис. 4.13. Сімейство вихідних вольт-амперних характеристик транзистора

Характерною особливістю вихідних вольт-амперних характеристик є майже незмінний нахил кривих струму на ділянці насичення струму стоку.

Тут треба відзначити, що рівні струму «відкритого» і «закритого» транзистора відрізняються достатньо суттєво.

Обчислення наведених вище вольт-амперних характеристик відбувалось за таких даних: C_{ins} – ємність діелектрика – 56 пФ; C_s – ємність витоку – 5·пФ; C_d – ємність стоку 2 пФ; температура кристалу транзистора 300 К.

На основі аналітичної моделі графенового транзистора в роботі [4.7] розраховано вихідні вольт-амперні характеристики для порівняльного аналізу з результатами моделювання за «ємнісною» моделлю за однакових фізико-топологічних параметрів.

На рис. 4.14 подано розраховані вольт-амперні характеристики транзисторів на основі графену. Для порівняння наведено графік, на якому розміщено по три криві для кожної моделі.

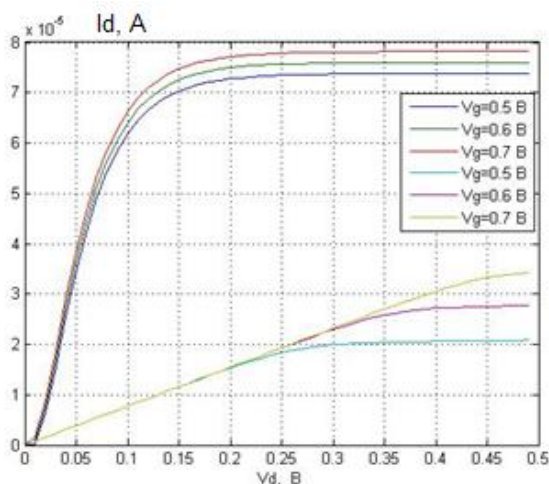


Рис. 4.14. Порівняльний аналіз вольт-амперних характеристик досліджуваних транзисторів

Три нижні криві відповідають залежностям першої («ємнісної») моделі транзистора, а три верхні – другої моделі досліджуваного транзистора. Дані залежності були побудовані за однакових значень напруги на затворі, яка змінювалася від 0,5 В до 0,7 В із кроком 0,1 В. Тобто нижня крива відповідає значенню 0,5 В даної напруги, а верхня – значенню 0,7 В. Відповідно для трьох кривих з меншими значеннями струму: нижня крива відповідає напрузі 0,5 В, а верхня – 0,7 В.

Із отриманих залежностей можна зробити висновок, що друга модель транзистора дає вищі значення струмів порівняно із ємнісною моделлю за однакових значень напруги на затворі. Також помітно, що криві ємнісної моделі переходять у стан насичення за менших значень напруги на стоці.

Для ідентифікації параметрів наведених вище математичних моделей необхідним є етап верифікації на масиві експериментальних даних для тестових структур нанотранзисторів.

Контрольні запитання та вправи

- 4.1. Які типи міжатомних зв'язків утворюють структуру графену?
- 4.2. Охарактеризуйте кристалічну структуру листа графену з ідеальними краями.
- 4.3. Поясніть залежність властивостей графену від ширини його стрічки.
- 4.4 Які методи отримання графенових стрічок є найбільш поширеними?

- 4.5. Наведіть приклади транзисторних структур з каналом на основі графенової стрічки.
- 4.6. Якими параметрами характеризується транзисторна структура з каналом на основі графенової стрічки?
- 4.7. Якими рівняннями описується характеристики транзисторної структури з каналом на основі графенової стрічки?
- 4.8. Чим відрізняються підходи до моделювання (модель1 і модель2), викладені у даному розділі?
- 4.9. Дайте пояснення результатів моделювання за різними математичними моделями.

5. МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОТРАНЗИСТОРІВ З СИСТЕМАМИ КВАНТОВИХ ЯМ І КВАНТОВИХ ТОЧОК

5.1. Структури гетеротранзисторів

Сьогодні можливості мікроелектронної технології дозволяють створювати структури, розміри яких хоч б по одній з координат менше 0,1 – 0,05 мкм – фундаментального «бар'єру» для твердого тіла, нижче за який аналіз поведінки носіїв заряду повинен враховувати хвильову природу електрона. До таких структур відносяться гетероструктури, квантові нитки, квантові точки, надгратки. У той же час, розвиток молекулярно-променевої епітаксії, газової епітаксії з металоорганічних сполук і методу селективного легування дозволяють отримувати тонкі плівки і шаруваті структури з товщиною шарів порядку одного атома і поверхневою концентрацією носіїв заряду порядку 10^{18} см^{-2} [5.1 – 5.4].

У гетероструктурному польовому транзисторі з високою рухливістю електронів існує внутрішнє поле в інверсійному каналі, обумовлене об'ємним зарядом притиснутих до стінок гетеропереходу електронів, яке, у свою чергу, призводить до квантування руху електронів перпендикулярно площині гетеропереходу. Ширина «трикутної» потенціальної ями каналу порівнянна з довжиною хвилі де Бройля для електрона (характерний масштаб величини складає $\lambda_e \approx 10^{-6} \text{ см}$). У площині гетеропереходу електрони рухаються як вільні частинки. Наявність тонкого нелегованого шару в широкозонній частині структури гетеропереходу ослаблює розсіяння електронів у каналі на далекодіючому кулонівському потенціалі іонів домішок і ще більш підвищує рухливість електронів у каналі. Особливістю двовимірних структур є виродження електронного газу у тонкому шарі матеріалу, який набуває завдяки цьому «металевої» провідності.

Створення елементної бази на квантових ямах, утворених гетеропереходами, є одним з основних напрямів розвитку наноелектроніки. Поряд з ефектом підвищення дрейфової швидкості носіїв у каналі польового транзистора гетероструктурні конструкції використовуються для зменшення часів переключення транзисторів із застосуванням квантових ефектів, наприклад, таких, як перекриття хвильових функцій електрона у разі двох близько розташованих квантових ям. Прикладом подібних напівпровідникових наноструктур з унікальними характеристиками є, зокрема, транзистори з модуляцією швидкості носіїв (*Velocity Modulation*

Transistor – VMT), швидкодія яких не обмежена часом прольоту електронами каналу [5.5].

Структури з модуляцією швидкості носіїв мають два паралельні канали, що є квантовими ямами, які сполучають області стоку і витоку і розділені тунельним гетероперехідним бар'єром. У першому каналі рухливість електронів висока, а в другому – низька. Зниження рухливості носіїв заряду в другому каналі досягається завдяки легуванню області квантової ями і розсіяння носіїв на іонах домішки, або внаслідок інтенсивного розсіяння на гетерограницях [5.5]. В останньому випадку ширина другої квантової ями значно менша за ширину першої.

Управління транзистором здійснюється поперечним електричним полем, яке створюється двома вертикально розташованими затворами, або затвором і витоком. Керуюче поперечне поле перерозподіляє носії заряду між каналами. При цьому відкритому стану транзистора відповідає перенесення основної частини електронів у перший канал, де вони набувають високої швидкості дрейфу. Закритому стану відповідає перенесення електронів до другого каналу, де їх рухливість знижується, а опір каналу відповідно збільшується. Таким чином, за час прольоту електрони можуть кілька разів перерозподілятися між двома паралельними тунельно-зв'язаними каналами, що в принципі дозволяє, враховуючи у край малу інерційність процесу тунелювання, досягти часу перемикання значно меншого, ніж час прольоту. При цьому, сумарне число носіїв у каналах залишається практично незмінним [5.5].

Основним недоліком таких транзисторів є порівняно низьке відношення струмів транзистора у відкритому і закритому станах (2 – 2,5 за температури $T = 300$ K), обумовлене низьким відношенням значень рухливості носіїв у каналах і впливом ефекту насичення швидкості дрейфу в короткоканальних приладах, що ускладнює їх застосування для створення інтегральних логічних елементів.

Тунельно-зв'язані наноструктури на основі гетеропереходів GaAs/AlGaAs з електронною і дірковою провідністю показані на рис. 5.1.

Верхніми переходами, що управляють, є переходи Шоттки, а нижні — відповідно *p-n*-переходи, виконані з застосуванням прихованих *n+* і *p+* областей в епітаксialьних шарах $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$. Області іонного легування розділені шарами широкозонного нелегованого AlAs завтовшки більше 20 нм для запобігання тунелювання носіїв між ними. Леговані бар'єрні області *n/p*- $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ відокремлені від квантових ям *i*- $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ спейсерами для ослаблення розсіяння рухливих носіїв у квантових ямах на далекодіючому кулонівському потенціалі іонів домішок. Ширина квантових

ям складає не менше 15 нм для зменшення розсіювання рухливих носіїв на границях гетеропереходів [5.5].

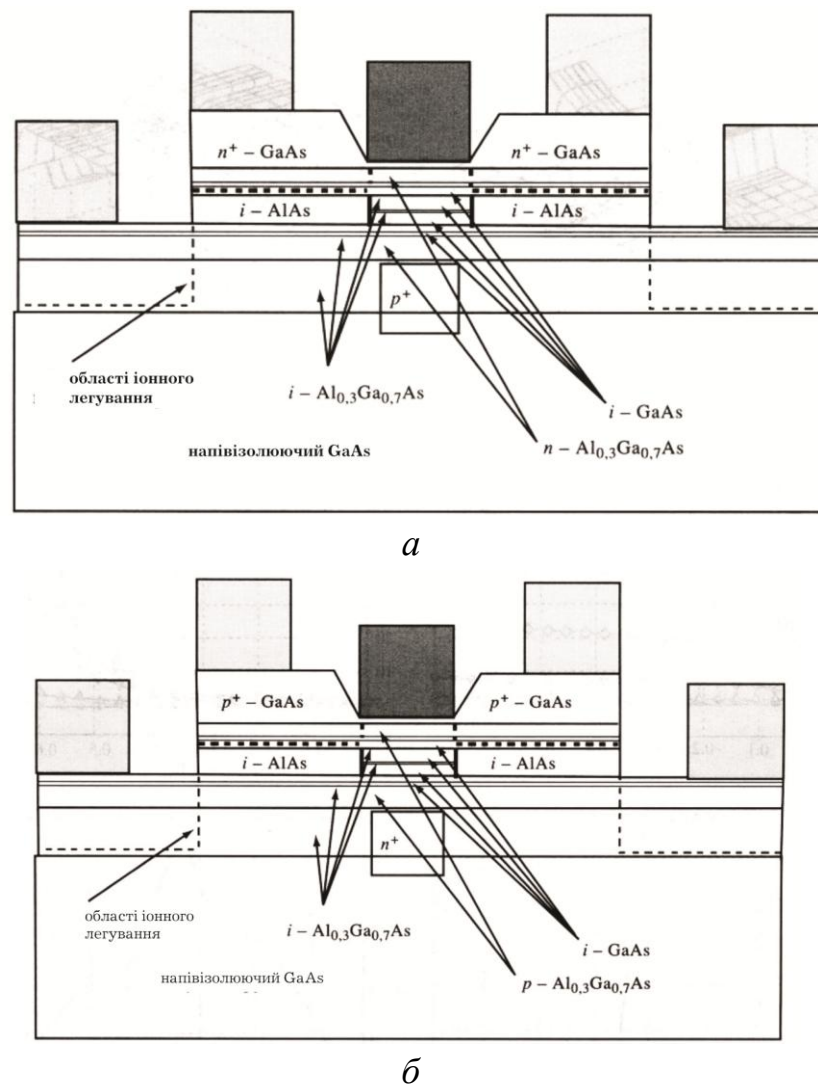


Рис. 5.1. Тунельно-зв'язані наноструктури з електронною (а) та дірковою (б) провідністю

Прилади з активними областями розміром у напрямі руху зарядів порядку довжини вільного пробігу і менше є балістичними, оскільки проліт в активній області відбувається внаслідок накопиченої при інжекції енергії. І в той же час перенесення електронів у транзисторах з розміром активної області, сумірної з довжиною хвилі електрона, носить квантовий характер. Довжина вільного пробігу електрона за $T = 300$ К має характерний масштаб 10^{-5} см для розсіювання на акустичних фонах і 10^{-6} см для сильного оптичного розсіювання.

5.2. Параметри структур гетеротранзисторів

Поряд із використанням нових конструкцій покращення характеристик гетеротранзисторів досягається застосуванням перспективних матеріалів для реалізації тих чи інших приладів [5.6]. Напівпровідникові прилади на основі нітридів (нітриду галію, алюмінію, бору, індію) вигідно відрізняються за характеристиками від приладів на основі кремнію і арсеніду галію і найбільш перспективні для створення потужних транзисторів. Найбільш істотні відмінності полягають у наступному [5.7]:

- ширина забороненої зони E_g нітридних напівпровідників забезпечує великий розрив зон провідності на гетерограниці AlGaN/GaN ($\Delta E_c > 0,5$ eV) що різко зменшує струми через затвор і зі збільшенням мольної частки Al енергетичний зазор ΔE_c зростає;
- густина електронів у двовимірному каналі ($n_s > 1 \cdot 10^{13}$ см⁻²) на порядок вища, ніж у GaAs, що обумовлене як модульованим легуванням з широкозонного шару AlGaN, так і п'єзoeлектричною поляризацією, тобто додатним зарядом на гетерограниці AlGaN;
- швидкість насичення $v_s > 2,5 \cdot 10^7$ см/с за великих значень електричних полів у GaN також вища, ніж у GaAs, і залишається високою при збільшенні температури;
- поля електричного пробію у GaN у 8 разів вищі, ніж в GaAs ($33 \cdot 10^5$ В/см і $4 \cdot 10^5$ В/см відповідно), що за високих значень висоти бар'єрів на затворі дозволяє прикладати напругу стік-витік V_{ds} до 100...400 В;
- великі значення n_s у поєднанні з високими пробивними полями забезпечують щільність НВЧ-потужності у GaN-польових транзисторах на порядок більшу, ніж у GaAs;
- часи прольоту у субмікронному каналі (довжина затвору $L_g < 1$ мкм) у сильних полях зменшені через балістичний ефект, який полегшений відсутністю непружних зіткнень оптичних фононів (у GaN $\hbar\omega_0 = 91$ меВ, а в GaAs $\hbar\omega_0 = 36$ меВ);
- у GaN мала ймовірність міждолинних переходів гарячих електронів, оскільки найближчі екстремуми зони провідності в інших точках зони Бріллюена знаходяться вище приблизно на 6 eV;
- процеси генерації-рекомбінації через міжграничні і поверхневі рівні в GaN-приладах ослаблені через великі значення E_g ;
- підвищена теплопровідність GaN (1,7 Вт/см·К) у порівнянні з GaAs (0,53 Вт/см·К) забезпечує працездатність приладів аж до 400 °С;

— велика ефективна маса електрона ($0,2m_0$ у GaN і $0,067 m_0$ у GaAs) забезпечує меншу ймовірність розсіювання за підвищених температур.

Інша можливість переходу до наноструктур полягає у створенні періодичних структур, що складаються з різних напівпровідників, з шарами завтовшки декілька нанометрів. Практична реалізація цих ідей можлива внаслідок розвитку техніки молекулярно-променевої і газової епітаксії з металоорганічних сполук. У такому випадку є можливість отримання структур, що включають від декількох десятків до декількох сотень тонких шарів з різкими границями, а товщина перехідних шарів складає один – два атоми [5.8]. У такому разі шари на шляху руху електрона становитимуть для нього потенціальні ями і бар'єри, а характер проходження і відбиття від них визначатиметься хвиліною природою руху електрона.

Останнім часом активно досліджуються гетероструктури з квантовими точками, а саме зв'язані стани в КТ, які є перспективними для створення модуляторів і швидкодіючих лазерів.

У разі надграток з КТ (НГКТ) унаслідок прояву ефекту Ваннье–Штарка наявність слабкого однорідного електричного поля ($eEd < \Delta_{\text{МЗ}}$, де e – заряд електрона, E – напруженість електричного поля, d – період надгратки, $\Delta_{\text{МЗ}}$ – ширина міні-зони надгратки), прикладеного до НГ, знімає виродження енергій у міні-зонах, що призводить до серії дискретних рівнів, що названі станами сходів Ваннье–Штарка [5.9]. Ці стани поширюються на декілька періодів НГ з довжиною локалізації $L = \Delta_{\text{МЗ}} / F$. Зі збільшенням поля зв'язування хвильових функцій електронів буде подавлятися, вони перетворюватимуться на хвильові функції одиначної КТ і локалізуватимуться в одній КТ (ефект локалізації Ваннье–Штарка). У даний час є достатнє число повідомлень, у яких передбачається і спостерігається ефект Ваннье–Штарка у надгратках з квантовими ямами [5.10 – 5.12]. Автори статті [5.9] були першими, хто досліджував ефект Ваннье–Штарка НГКТ Ge в p - n -гетероструктурі Ge/Si.

Багатошарова структура з КТ InAs/GaAs досліджувалась за допомогою електронної мікроскопії. Результати цих досліджень представлені на рис. 5.2 і показують, що досліджувана система містить 10 шарів квантових точок InAs між шарами GaAs завтовшки $\sim 30 \text{ \AA}$.

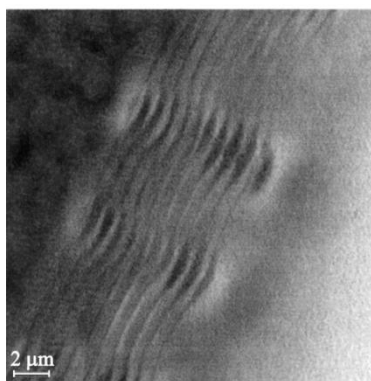


Рис. 5.2. Мікрофотографія поперечного перетину зразка з 10 шарами КТ InAs і товщиною прошарку GaAs між ними 30 Å

Були проведені виміри вольт-фарадних характеристик багатошарової $p+-n+-$ гетероструктури з КТ InAs/GaAs у темноті за двох умов попереднього ізохронного відпалу (для прикладеної, $V_{\text{ОБР}} \neq 0$, і нульової, $V_{\text{ОБР}} = 0$, напруги зміщення) і для оптичного підсвічування. У досліджуваній структурі були визначені профілі розподілу концентрацій вільних електронів $n^*(V_{\text{ОБР}})$ (рис. 5.3), розраховані з вольт-фарадних характеристик $C(V_{\text{ОБР}})$ для двох умов попереднього ізохронного відпалу ($V_{\text{ОБР}} \neq 0$ і $V_{\text{ОБР}} = 0$) і при оптичному підсвічуванні. Вони показали наявність двох піків, поява яких може бути пов'язана з вивільненням носіїв, акумульованих як на станах КТ, так і на локалізованих станах на границі InAs/GaAs. Як показано на рис.5.3, в структурах з КТ можливе ефективне управління концентрацією вільних носіїв за допомогою прикладеної напруги, яка змінює провідність області з вбудованими КТ.

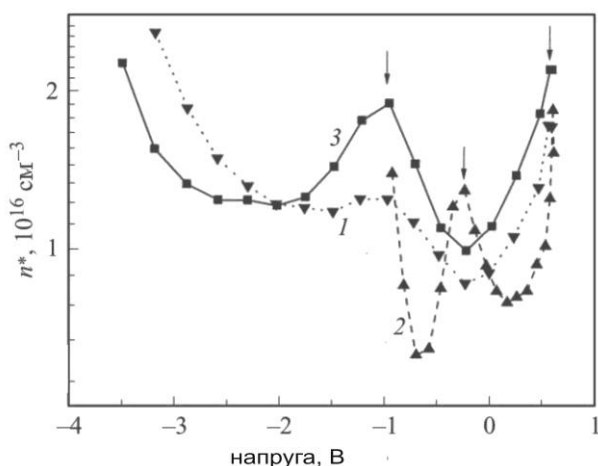


Рис. 5.3. Профілі розподілу ефективної концентрації електронів у $p-n$ -гетероструктурі з 10-ма шарами КТ InAs у матриці GaAs після попереднього ізохронного відпалу (криві 1, 3 – для $V_{\text{ОБР}} < 0$; 2 – $V_{\text{ОБР}} > 0$; 3 – для оптичного підсвічування)

5.3. Параметри квантових точок

Мінімальний розмір. Нижня межа для розміру КТ визначається розміром, для якого у КТ існує хоча б один електронний рівень. Цей критичний розмір (D_{\min}) істотно залежить від величини розриву зони провідності (ΔE_c) у відповідному гетеропереході, який використовувався для отримання КТ. У сферичній квантовій точці хоч би один електронний рівень існує у тому випадку, якщо ΔE_c перевищує величину [5.13]:

$$\Delta E_c^* = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\pi}{D_{\min}} \right) \equiv \Delta E_1^{QW},$$

де m_e^* – ефективна маса електрона і ΔE_c^* – перший у прямокутній квантовій ямі (КЯ) рівень з нескінченними стінками.

Вважаючи величину розриву у зоні провідності біля 0,3 еВ, типову для прямозонних КЯ в системі GaAs/Al_{0,4}Ga_{0,6}As, можна показати, що діаметр КТ не має бути меншим за 40 Å. Це, взагалі кажучи, абсолютна нижня межа для розміру КТ. Оскільки для КТ навіть дещо більшого розміру енергетична відстань між електронним рівнем в КТ і електронним рівнем у матеріалі матриці буде настільки малою, що навіть для скінченних температур тепловий викид носіїв з КТ може привести до їх спустошення. Для системи InAs/AlGaAs величина розриву зони провідності істотно більша, проте електронна маса менша, і, таким чином, величини $\Delta E_c m_e^*$ сумірні, а критичні розміри КТ близькі.

Максимальний розмір. Якщо відстань між енергетичними рівнями стає порівняною з тепловою енергією ($k_B T$), то зростає заселеність високих рівнів. Для квантових точок умова, за якою заселенням більш високих рівнів можна нехтувати, записується як [5.13]:

$$k_B T \leq \frac{1}{3} (E_2^{QD} - E_1^{QD}),$$

де E_1^{QD} , E_2^{QD} — енергії першого і другого рівнів розмірного квантування відповідно.

Звідси випливає, що у разі сферичної (або кубічної) КТ, переваги розмірного квантування можуть бути повністю реалізовані для [5.13]:

$$k_B T \leq E_1^{QW}.$$

Цю умову встановлює верхня межа для розміру КТ порядку 120 Å в системі GaAs/AlGaAs і порядку 200 Å для системи InAs/GaAs у зв'язку з істотно меншою ефективною масою електрона в останньому випадку. Ефективне квантування дірки вимагає ще менших розмірів.

Геометрія і спектр електронних станів КТ залежать від ряду чинників. За оптимальних умов осадження при 460° С на поверхні формуються пірамідальні квантові точки InAs з квадратною основою (~120 Å), з основними вісями, орієнтованими у напрямках {001}, і заввишки ~60 Å [5.13]. Збільшення температури підкладки до 480 і 520 °С приводить до збільшення латерального розміру острівця до 140 і 180 Å відповідно. У такому разі висота КТ зменшується.

На основі модельних розрахунків методами молекулярної динаміки було показано, що адекватне зображення КТ в електронній мікроскопії високого розрізнення, що просвічує, у поперечному перетині може бути отримане лише за умови оптимального дефокусування, за товщини плівки не більше двох латеральних розмірів КТ і за умови, що КТ цілком захоплена плівкою. Інакше пірамідальна квантова точка виглядає усіченою, і її реальний розмір може бути як заниженим, так і завищеним полями напруги в матриці, обумовленими КТ. У електронно-мікроскопічних зображеннях на просвічування (не високого розрізнення) зображення пірамідальних КТ завжди мають форму "лінз" або "усічених пірамід" незалежно від умов візуалізації [5.13].

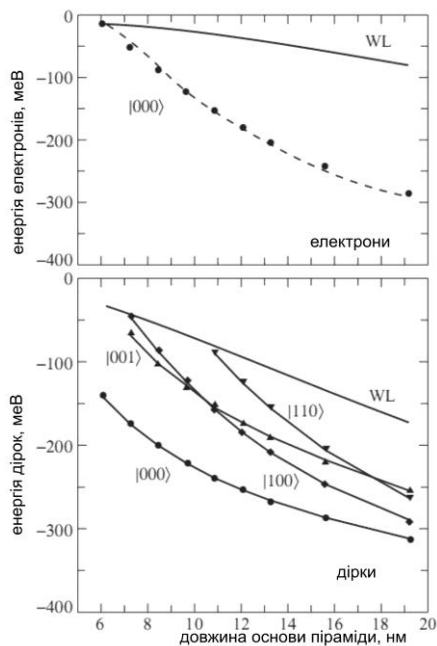


Рис. 5.4. Енергії основного стану електрона, основного і збуджених станів дірки в квантовій точці InAs, яка має форму піраміди з квадратною основою у площині (001) і бічними гранями (101) і що знаходиться в матриці GaAs (Значення енергій наведені залежно від довжини основи піраміди)

На рис. 5.4 представлена залежність енергії основного стану електрона і основного і збуджених станів дірки, як функція розміру основи піраміди [5.13]. Наведені залежності ілюструють ефект просторового обмеження за якого має місце залежність енергії носіїв електронів і дірок від розмірів квантових точок.

5.4. Гетеротранзистор з квантовими точками

У структурі гетеротранзистора заряди прискорюються електричним полем до енергії оптичного фонона, а потім втрачають набуту у цьому полі швидкість у результаті непружного розсіяння з емісією оптичного фонона. Подальше підвищення швидкодії гетероперехідних транзисторів пов'язане з технологічними обмеженнями можливостей літографії і з обмеженням максимальної дрейфової швидкості носіїв ($v_{др} \approx 10^7$ см/с), яка, у свою чергу, пов'язана з непружним розсіянням електронів на оптичних фононах і є фундаментальною сталою матеріалу. Вирішенням проблеми підвищення дрейфової швидкості електронів у сильних електричних полях може бути виключення непружного розсіяння електронів оптичними фононами у каналі транзистора шляхом квантування моментів (коливань) фононів [5.14].

Формування у квантовій ямі GaAs шарів КТ InAs приводить до квантування моментів оптичних фононів в GaAs між КТ InAs як в подовжньому, так і в поперечному відносно руху електрона напрямі. Кожна лінзоподібна КТ є відбивачем оптичних фононів в GaAs [5.15]. На рис.5.5 наведено схематичне зображення топології гетеротранзистора з КТ.

Мінімальний момент оптичного фонона у напрямі x визначається формулою:

$$q_x = \frac{\pi}{l_x},$$

де l_x – товщина шару GaAs між КТ InAs і гетеропереходом.

Якщо $l_x < 12,5$ нм, то електрони у своєму русі під дією поля досягають енергії оптичного фонона, не зустрічаючи фононів, на яких могли б розсіятися, тому їх дрейфова швидкість зростає із зростанням електричного поля, поки не відбувається непружне розсіяння на квантованому оптичному фононі [5.15].

Умови збереження енергії і імпульсу дають для нового максимального значення дрейфової швидкості електрона у напрямі, перпендикулярному x :

$$\frac{v_{\max}}{v_s} = 1 + \left(\frac{L_{opt}}{l_x} \right)^2.$$

Необхідною умовою для істотного збільшення максимальної дрейфової швидкості є малий розмір «довжини квантування» l_x . Цю умову можна виконати за достатньої щільності КТ, що створюють суцільний бар'єр уздовж всього каналу структури, і малої товщини шарів GaAs між шарами КТ. Наприклад, у GaAs для $l_x = 4$ нм відповідно до наведеного вище співвідношення дрейфова швидкість електрона при квантуванні моменту фонона перевищує максимальну дрейфову швидкість при розсіянні на об'ємних фононах v_s у 10 разів [5.14].

Таким чином, гетероструктурний польовий транзистор з квантовими точками відкриває нові можливості підвищення швидкодії і коефіцієнта підсилення напівпровідникових приладів в області сотень ГГц. Причому, досягається це не граничними можливостями субмікронної літографії, а внаслідок використання двох фізичних чинників: безінерційної ударної іонізації КТ у сильному електричному полі і радикального підвищення дрейфової швидкості електронів в каналі транзистора.

Представлені теоретичні описи таких приладів не містять якісного і кількісного опису розподілу характеристик носіїв заряду в об'ємі транзисторної структури. Можливості технології дозволяють на сьогоднішній день виготовлення масивів КТ з невеликим розкидом параметрів. Проте, сучасна технологія ще не дозволяє зробити вирощування КТ повністю контрольованим і відтворним. Тому, неоднорідність острівців квантових точок призводить до додаткової напруженості електричного поля у транзисторі, у тому числі, у напрямі ширини затвора.

5.5. Чисельне моделювання гетеротранзисторів з квантовими точками

Існує ряд підходів до моделювання тих чи інших характеристик субмікронних приладів, у тому числі і завершені програмні продукти з вбудованими функціями розв'язання фундаментальної системи рівнянь для напівпровідників з врахуванням особливостей структур. Але, не дивлячись на це різноманіття, сьогодні актуальною проблемою є опис фізичних процесів у сильних електричних полях для субмікронних гетероструктур з квантовими ямами і квантовими точками. Можливий комбінований підхід побудови фізико-топологічної моделі гетеротранзистора з КТ, яка включає релаксаційні рівняння і рівняння, які описують процеси у квантових системах і розв'язуються самоузгоджено. Оскільки під час моделювання субмікронних

структур, особливо, якщо ці структури містять неоднорідності, необхідно враховувати великі градієнти поля, то збіжність того чи іншого методу сильно залежить від вибору початкового наближення і кроку сітки.

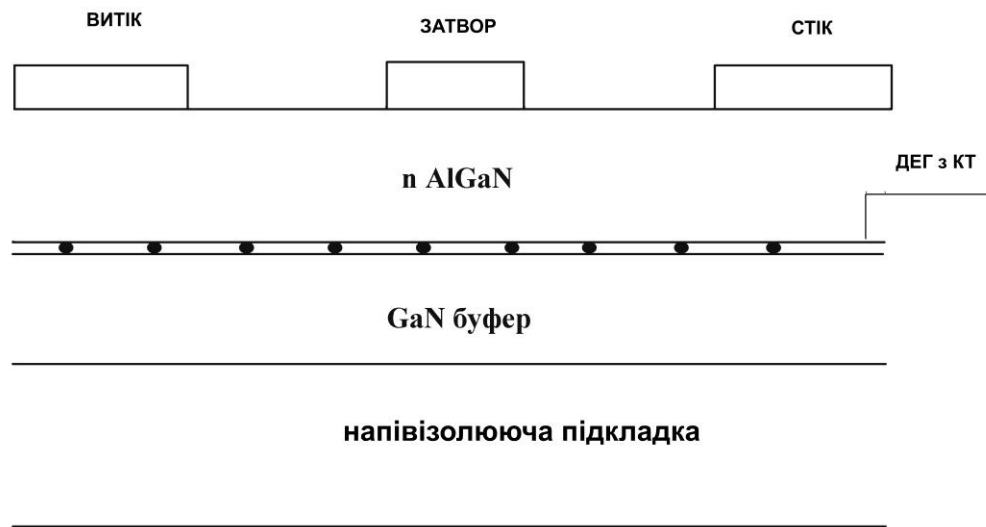


Рис. 5.5. Схематичне зображення топології гетеротранзистора з КТ

У роботі [5.16] досліджено структуру гетеротранзистора з квантовими точками двох типів (S_1 і S_2), вирощених методом молекулярно-променевої епітаксії на напівізолюючій підкладці GaAs (100). Їх поперечний перетин схематично наведено рис. 5.5. Структура включає нелегований буферний шар GaAs товщиною 0,5 мкм, два дуже тонких шари InAs, розділених нелегованим спейсер-шаром GaAs. Для зразків S_1 товщина шарів InAs складала 1,07 нм, а спейсер-шару GaAs – 5,6 нм. Для зразків S_2 ця товщина була 0,7 і 3,7 нм відповідно (рис.5.6).

У обох випадках формувалися два шари КТ з різними розмірами і щільністю. Потім, після вирощування другого спейсер-шару GaAs з товщиною 5,6 і 3,7 нм для зразків S_1 і S_2 відповідно, вирощувалися нелегований спейсер-шар $Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ товщиною 10 нм, Si-легований шар і нелегований бар'єрний шар $Al_{0,2}Ga_{0,8}As$ товщиною 35 нм. Формування гетероструктур завершувалося вирощуванням нелегованого шару GaAs товщиною 6 нм і легovanого кремнієм ($3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$) контактного шару GaAs товщиною 40 нм. Як зразки для порівняння були вирощені псевдоморфні напружені гетероструктури $AlGaAs/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ без КТ, але з тією ж середньою мольною часткою In ($y = 0,7$) і товщиною шару $In_{0,17}Ga_{0,83}As$ 12 нм.

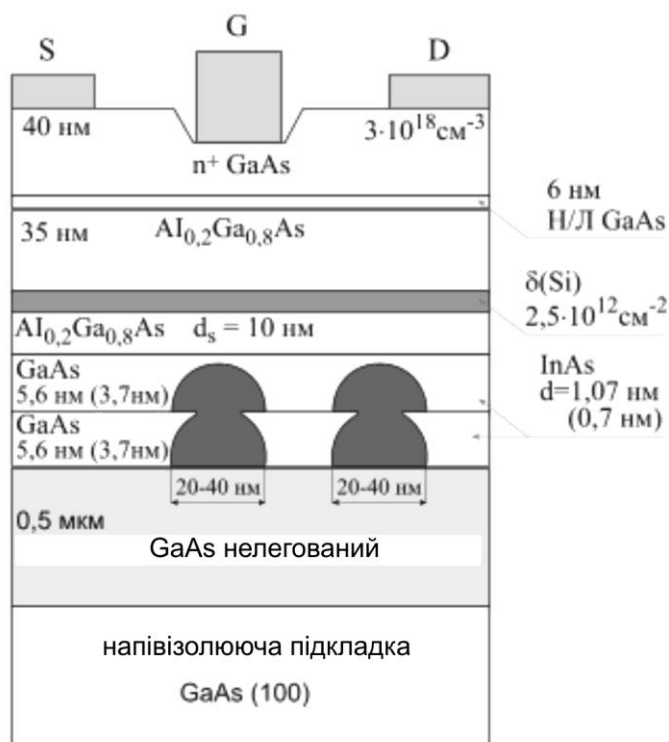


Рис. 5.6. Поперечний перетин гетероструктури з КТ

Для моделювання використано спрощений варіант такого транзистора з меншою кількістю шарів. Його схематичне зображення показано на рис. 5.7. Товщина шарів, матеріали і подовжні розміри можуть змінюватися як параметри, що впливають на фізичні властивості досліджуваного об'єкту. Квантові точки розташовані в області гетеропереходу, і їх поверхнева концентрація і розміри також є параметрами моделі.

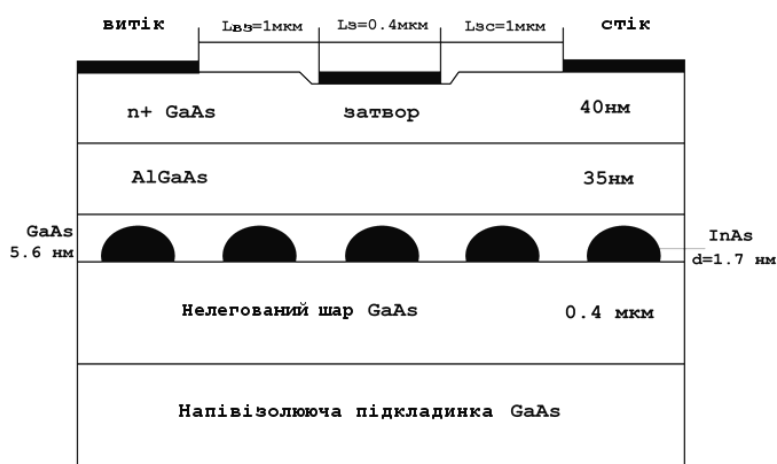


Рис. 5.7. Гетероструктурний транзистор з КТ

Для опису стаціонарних процесів у напівпровідниках можна скористатися системою релаксаційних рівнянь, отриманих з рівняння Больцмана [5.17].

Для більшої наочності перепишемо систему релаксаційних рівнянь, доповнену рівняннями Пуассона і густини струму:

$$\begin{aligned}v_x \frac{\partial n}{\partial x} + v_y \frac{\partial n}{\partial y} &= 0, \\v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} &= \frac{eE_x}{m^*} - \frac{v_x}{\tau_p}, \\v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} &= \frac{eE_y}{m^*} - \frac{v_y}{\tau_p}, \\v_x \frac{\partial T_e}{\partial x} + v_y \frac{\partial T_e}{\partial y} &= -\frac{T_e - T_0}{\tau_E} + \frac{2E_D}{3k_B}(\gamma - 1), \\\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} &= -\rho / \epsilon \epsilon_0, \\\vec{j} &= -en\vec{v}.\end{aligned}$$

Рівняння Пуассона є диференціальним рівнянням у часткових похідних другого порядку еліптичного типу. У загальному вигляді диференціальне рівняння еліптичного типу може бути представлено як [5.18]:

$$-\nabla \cdot (c \nabla \psi) + a\psi = f \text{ для області,}$$

де ψ – невідома величина, а коефіцієнти c, a, f визначаються в модельованій області Ω .

Граничні умови для такого рівняння можуть бути наступні:

- Дирихле – $h\psi = r$ на границі $\partial\Omega$;
- Неймана – $\mathbf{N} \cdot (c \nabla \psi) = g$ на границі $\partial\Omega$;
- узагальнені умови Неймана – $\mathbf{N} \cdot (c \nabla \psi) = q - \psi g$ на границі $\partial\Omega$,
де \mathbf{N} – одиничний вектор нормалі, g, q, h і r – функції, які визначаються в $\partial\Omega$.

Для транзисторної структури (рис. 5.7) при постановці задачі моделювання на вільних границях обираються граничні умови Неймана, а на електродах – умови Дирихле.

Для розв'язання останнього рівняння необхідно провести його дискретизацію на заданій сітці. У даному випадку обрана триангулярна дискретизація по методу скінченних елементів Делоне. Такий вибір обумовлений наявністю неоднорідностей у субмікронних структурах на границях розділу і самими розмірами структури, і, як наслідок, наявністю великих градієнтів потенціалу. Триангуляція передбачає нерівномірне

розбиття модельованої області з адаптацією кроку в області неоднорідностей, таких, наприклад, як області електродів. Цей підхід значно скорочує обчислювальні витрати, порівняно з використанням рівномірної сітки, і прискорює збіжність.

Після множення рівняння на довільну функцію v і інтегрування по частинах отримуємо вираз по всій області із застосуванням формули Гріна:

$$\oint_{\Omega} ((c\nabla\psi)\nabla v + a\psi v)dx - \oint_{\partial\Omega} \mathbf{N}(c\nabla\psi)v ds = \oint_{\Omega} f v dx.$$

Це рівняння спрощується для всієї границі області з використанням узагальнених граничних умов Неймана.

Спростимо це рівняння для всієї границі області, використовуючи узагальнені граничні умови Неймана. Дійсно, якщо прийняти $q = 0$, то отримаємо умови Неймана, а для $q \rightarrow \infty$ отримаємо умови Дирихле.

Після врахування граничних умов і перенесення всіх доданків у праву частину отримаємо наступний функціонал:

$$\oint_{\Omega} ((c\nabla\psi) \cdot \nabla v + a\psi v - f v) dx - \oint_{\partial\Omega} (-q\psi + g) v ds.$$

Мінімум даного функціонала буде розв'язком вихідного рівняння в часткових похідних (тобто, рівняння Пуассона).

Шляхом дискретизації останнього рівняння можна перейти до системи лінійних рівнянь у вигляді $\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{F}$, де \mathbf{u} вектор-стовбець невідомих, матриця \mathbf{K} складається з коефіцієнтів c , a , h , и q , і, а вектор \mathbf{F} складається із значень правої частини рівняння Пуассона, усереднених для кожного трикутника сітки з врахуванням вкладу g . Дана система може містити до десяти тисяч рівнянь. Для її розв'язання найбільш прийнятні ітераційні методи, такі, як методи Якобі, Гауса-Зейделя та інші [5.19].

Якщо розглянути рівняння Пуассона, то його функціонал запишеться таким чином [5.18]:

$$I(u) = \iint_{\Omega} \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^2 - 2\varphi f \right) dx dy,$$

де $f = -\rho / \varepsilon \varepsilon_0$.

Для представлення розподілу потенціалу за допомогою методу скінченних елементів використовується поліном, після дискретизації якого для порядку m отримано вираз [5.18]:

$$\Pi_m(x, y) = \sum_{k+r=0}^m \alpha_{kr} x_k y_r; \quad k, r = 1, 2, 3 \dots$$

Цей поліном може бути використаний для інтерполяції функції $\varphi(x, y)$ по значеннях $\frac{1}{2}(m+1)(m+2)$ у симетрично розташованих вузлах трикутника.

Для трикутника $P_1 P_2 P_3$ з координатами вершин $(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3)$ відповідно і при $m = 1$ інтерполюючий поліном має вигляд:

$$\Pi_1(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y = \sum_{j=1}^3 \varphi_j p_j^{(1)}(x, y),$$

$$\text{де } \alpha_1(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{23} + \eta_{23} x - \xi_{23} y);$$

$$\alpha_2(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{31} + \eta_{31} x - \xi_{31} y);$$

$$\alpha_3(x, y) = \frac{1}{C_{123}} (\tau_{12} + \eta_{12} x - \xi_{12} y);$$

φ_j – значення функції $\varphi(x, y)$ у вершинах p_j :

$$p_j^{(1)}(x, y) = \frac{1}{C_{jkr}} (\tau_{kr} + \eta_{kr} x - \xi_{kr} y) = \frac{D_{kr}}{C_{jkr}},$$

$$\text{тут } \tau_{kr} = x_k y_r - y_k x_r, \quad \eta_{kr} = y_k - y_r, \quad \xi_{kr} = x_k - x_r$$

$$D_{kr} = \begin{bmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_k & y_k \\ 1 & x_r & y_r \end{bmatrix}, \quad C_{jkr} = \begin{bmatrix} 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \\ 1 & x_r & y_r \end{bmatrix},$$

причому (j, k, r) – довільна перестановка з $(1, 2 \text{ і } 3)$, а $|C_{jkr}|$ – подвоєна площа трикутника $P_1 P_2 P_3$.

На рис. 5.8 представлений приклад розбиття модельованої транзисторної структури на трикутні комірки по методу Делоне. Трикутна сітка згущується в областях великих градієнтів потенціалу.

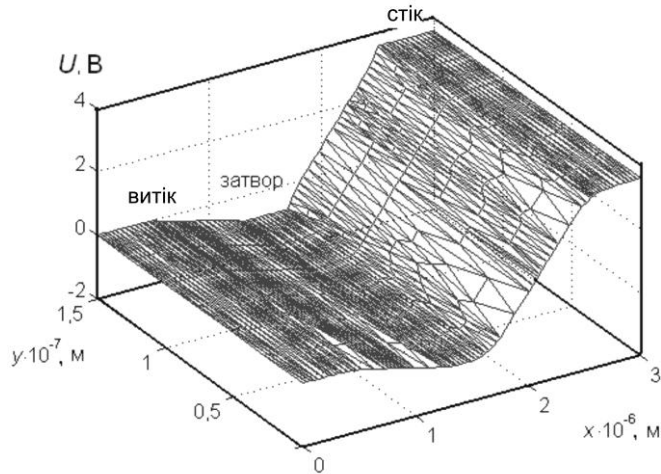


Рис. 5.8. Приклад триангулярного розбиття транзисторної структури

Розподіл потенціалу у результаті розв'язання рівняння Пуассона знаходиться з врахуванням розподілу концентрації рухливих носіїв заряду в правій частині рівняння у кожному зовнішньому циклі. Вихід із зовнішнього циклу здійснюється за умови досягнення функцією $\varphi(x, y)$ мінімуму відповідно до умови $\varphi''(x, y) \leq \delta$ (δ – задане, близьке до нуля число). Початковий розподіл рухливих носіїв у транзисторі приймається рівним нулю – тобто, на першій ітерації розв'язується рівняння Лапласа.

Для знаходження розподілу концентрації носіїв заряду використовується метод Ньютона. Збіжність методу дуже сильно залежить від вибраної цільової функції. В разі даної математичної моделі цей метод описується формулою [5.20]:

$$n_{i+1} = n_i - F_i'^{(-1)} F_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots,$$

тут цільова функція $F_i = \Delta\varphi - \frac{q}{\epsilon\epsilon_0}(n_i - N_d)$, у якій Δ – оператор Лапласа;

φ – потенціал; n_i – концентрація рухливих носіїв на попередньому кроці; N_d – концентрація донорної домішки.

Але, через наявність великих градієнтів електричного поля, більш адекватним є метод з дробленням кроку, оскільки у ньому закладена адаптація кроку для кожного вузла сітки:

$$n_{i+1} = n_i - \alpha_i F_i'^{(-1)} F_i, \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Величина α_i вибирається так, щоб забезпечити спад цільової функції на кожній ітерації. Цей вибір пов'язаний з перевіркою нерівності:

$$f(x_i + \alpha_i p_i) - f(x_i) \leq \delta \cdot \alpha_i (f'(x_i), p_i),$$

де $p_i = -(f''(x_i))^{-1} \cdot f'(x_i)$ – напрям спуску, а $0 < \delta < 1/2$ – деяке задане число, спільне для всіх ітерацій.

Якщо ця нерівність виконується при $\alpha_i = 1$, то приймається, що крок дорівнює одиниці і здійснюється наступна ітерація. Якщо ні – дробиться доти, поки нерівність не виконається.

Якщо ітераційний процес погано сходиться, то використовується прискорений метод Ньютона третього порядку [5.20]:

$$x_{i+1} = x_i - F_i'^{-1} F_i - \frac{1}{2!} F_i'^{-1} F_i'' (F_i'^{-1} F_i) (F_i'^{-1} F_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

Через швидку збіжність цього методу, досягти з його допомогою заданої точності досить важко, тому він може використовуватися для знаходження початкового наближення для методу Ньютона з дробленням кроку.

Рівняння збереження для електронної температури і проекцій швидкості є нелінійними сильно зв'язаними диференціальними рівняннями в частинних похідних першого порядку. До них входить напруженість електричного поля, яка пов'язана з потенціалом як $\vec{E} = -\text{grad}(\varphi(x, y))$. Разом з рівнянням Пуассона вони складають замкнену систему рівнянь, яка може бути розв'язана ітераційними методами з використанням початкового наближення для проекцій швидкості, які розраховуються з допомогою локальної моделі дрейфу по апроксимації емпіричної залежності швидкості від напруженості електричного поля.

У даній моделі для розв'язання рівнянь збереження електронної температури і проекцій дрейфової швидкості застосовувався метод послідовних наближень. Оскільки у дані рівняння входить функція від координат $z(x, y)$ і її перша похідна, то можна записати: $z = f(z)$. Тоді z_n виражатиметься через z_{n-1} по рекурентній формулі [5.21]:

$$z_n = f(z_{n-1}).$$

Завдання стає самоузгодженим після додавання до даної системи рівнянь виразів для розрахунку часів релаксації.

На сьогоднішній день можливості технології ще не дозволяють зробити вирощування КТ повністю контрольованим і відтворним. Тому неоднорідність острівців квантових точок і їх параметрів приводить до необхідності врахування випадкового характеру розташування, розмірів, енергетичних і інших характеристик КТ. Для моделювання нестационарних процесів дрейфу у транзисторній структурі у тривимірному випадку можна використовувати рівняння чисельної фізико-топологічної моделі, яка аналізувалася вище, у тривимірному наближенні. На рис. 5.9 наведено схематичне зображення структури модельованого транзистора.

Необхідність тривимірного моделювання фізичних процесів в гетеротранзисторах з КТ пов'язана як з особливостями топології (ширина затвора порівняна з довжиною каналу), так і випадковим характером параметрів КТ.

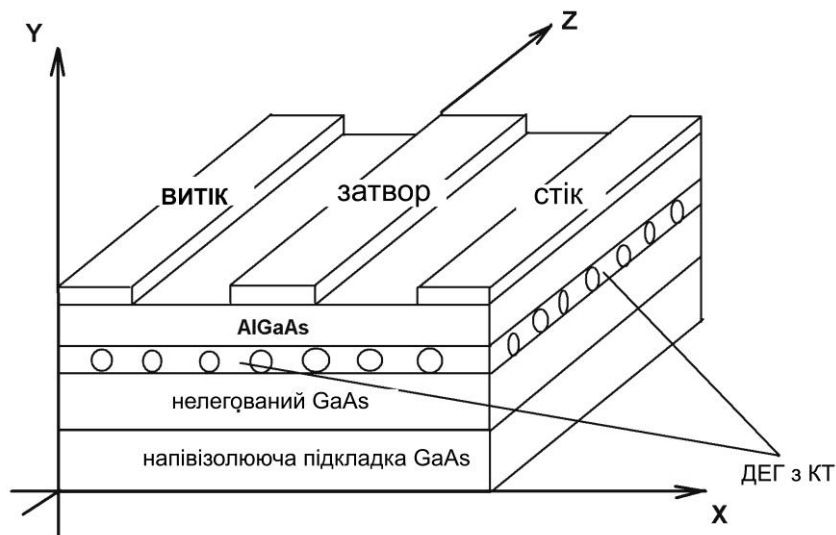


Рис. 5.9 . Схематичне зображення гетероструктурного польового транзистора з КТ;
ДЕГ – двовимірний електронний газ

Таким чином, один з підходів для розроблення моделі полягає у розв'язанні наведеної вище системи рівнянь з врахуванням самоорганізованих випадковим чином дефектів у вигляді квантових точок.

Проте чисельне моделювання на основі тривимірних рівнянь пов'язане з проблемою збіжності ітераційного процесу через високі градієнти потенціалу, як в області гетеропереходу, так і в областях локалізації КТ, а також з істотними обчислювальними витратами.

Інший спосіб обліку ефектів третього виміру може полягати у наступному:

1. Транзистор уздовж ширини затвора (уздовж осі z) розбивається на n секцій з розмірами, сумірними з розмірами КТ.

2. Для кожної секції задаються відповідні граничні умови, і із заданою точністю розв'язуються система двовимірних релаксаційних рівнянь. В результаті знаходиться розподіл потенціалу, швидкості і концентрації носіїв. Фізичні процеси в каналі і в КТ моделюються шляхом вбудовування в потенціальний рельєф кожної секції сходинок потенціалу: для квантової ями і для КТ.

3. Для розрахунку випадкового характеру параметрів КТ і задання цих параметрів для кожної секції транзистора використовується метод Монте-Карло. Значення потенціалу точок лежить у межах 0,5 – 0,8 В. Загальна щільність КТ повинна складати $3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$.

4. Для розрахунку просторових розподілів електричного поля, швидкості, концентрації носіїв і повного струму через транзистор отримані розподіли і струми для n секцій вихідної структури інтегруються уздовж напрямку z .

5.6. Релаксаційні процеси у гетеротранзисторі з квантовими точками

На рис. 5.10 показані отримані розподіли потенціалу (а) і енергії носіїв (б) в структурі GaN/AlGaN гетеротранзистора з КТ з такими параметрами: довжина затвора 0,4 мкм, напруга на затворі $-0,2 \text{ В}$, напруга на стоці -4 В [5.22]; на рис. 5.11 – розподіл напруженості поля в цьому ж транзисторі. Канал і КТ моделювалися шляхом вбудовування в потенціальний рельєф сходинок потенціалу: 0,3 В для квантової ями і 0,7 В для КТ без врахування в них квантових ефектів. Знаходження носіїв у квантовій точці є енергетично вигідним, що пояснює факт перерозподілу носіїв в каналі між квантовою ямою і квантовими точками.

У роботі [5.23] також показано, що дрейфова швидкість носіїв (рис. 5.12) при вбудовуванні у канал квантових точок зростає порівняно із звичайним гетеротранзистором. Це пов'язано з тим, що за високої щільності КТ у гетеропереході частина електронів двовимірного гетерошару, долаючи потенціальний бар'єр у підкладці при розігріванні електричним полем, може «захоплюватися» квантовими точками. Середня енергія таких електронів буде істотно меншою, ніж електронів двовимірного електронного газу гетеропереходу. Інший механізм «охолодження» електронного газу пов'язаний з інжекцією в канал електронів провідності з малими початковими енергіями, що зменшує ймовірність їх розсіяння на оптичних

фононах, яке є переважаючим в субмікронних структурах в умовах сильних електричних полів. Обидві ці обставини призводять до зменшення середньої температури колективу електронів і збільшення значень дрейфової швидкості.

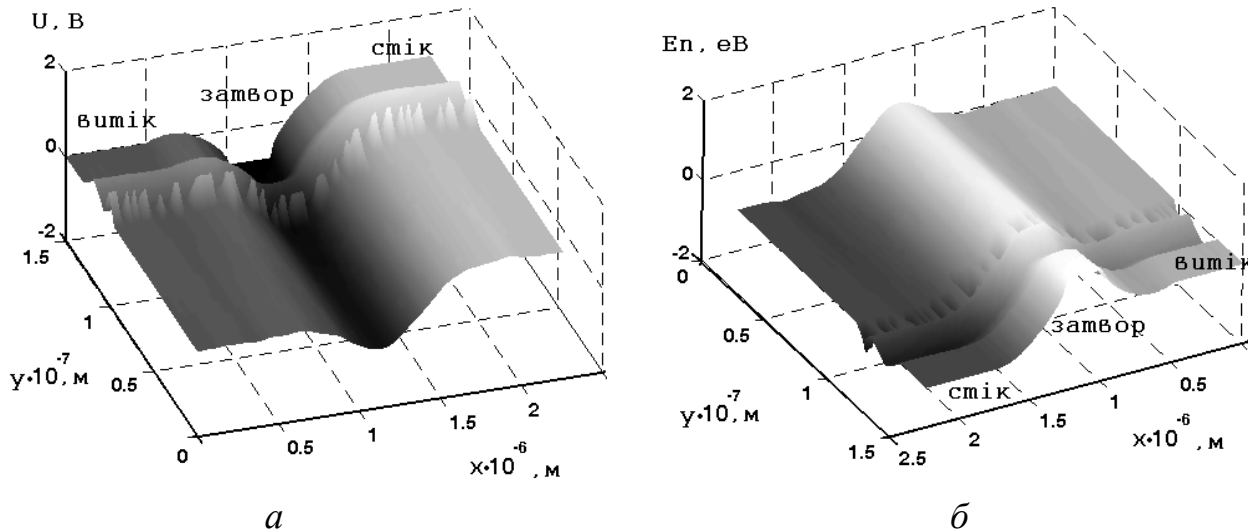


Рис. 5.10. Розподіл потенціалу (а), енергетична поверхня (б) у гетероструктурному транзисторі з КТ

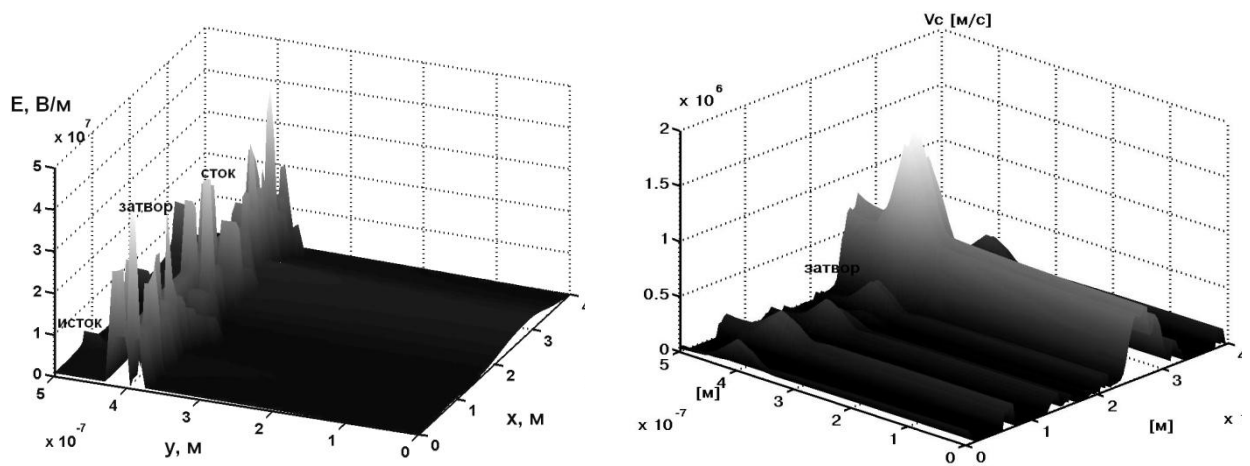


Рис. 5.11. Розподіл напруженості поля в гетероструктурному транзисторі з КТ

Рис. 5.12. Розподіл дрейфової швидкості в структурі транзистора з КТ

Далі наведені результати розрахунку швидкостей носіїв заряду за допомогою описаних методів для трьох різних профілів потенціальної ями в гетероструктурному польовому транзисторі [5.24] (рис. 5.13).

Розрахунки наведені для потенціалу витоку – 0 В, затворі – 0 В і стоку – 4 В. Для субмікронної структури з довжиною каналу 0,2 мкм цей режим є режимом насичення і супроводжується сильним розігріванням електронного газу. У такому режимі підвищення швидкості носіїв отримане для трикутного профілю – буля дна, а для прямокутного – біля стінок потенціальної ями. Це може бути пов'язано зі зміною механізмів взаємодії електронів з оптичними фононами, розсіяння на яких переважає з підвищенням температури електронного газу.

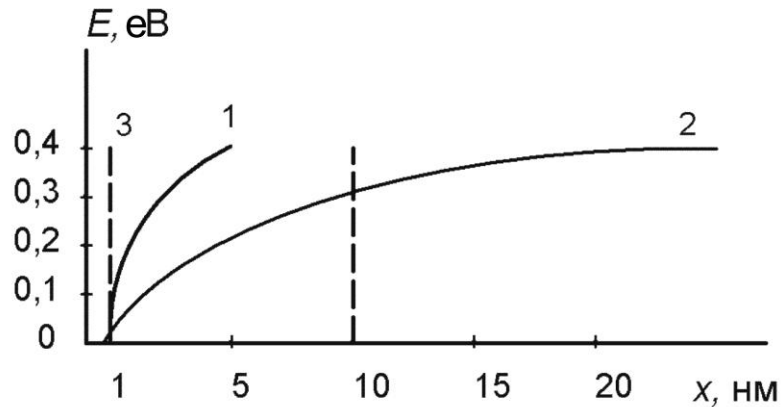


Рис. 5.13. Профілі потенціальних ям (ПЯ) в гетероструктурному транзисторі: 1 – «трикутна» яма шириною 4 нм; 2 – «трикутна» яма шириною 20 нм («хвіст» «трикутної» ями направлений у бік підкладки); 3 – «прямокутна» яма шириною 9 нм

Як показують результати розрахунків без врахування квантових ефектів у разі «трикутної» потенціальної ями (рис. 5.13, крива 1) вплив на розподіл дрейфової швидкості носіїв заряду практично відсутній (див рис. 5.14–5.16).

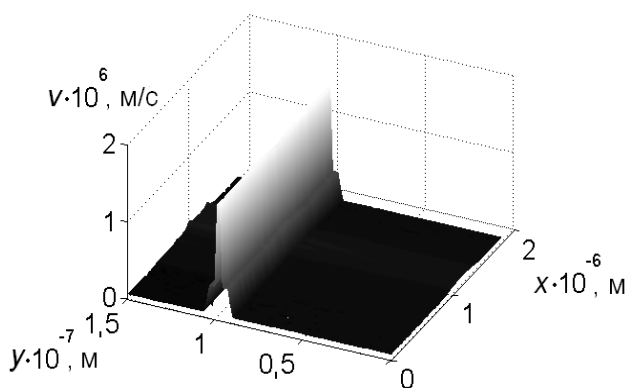


Рис. 5.14 – Розподіл швидкості носіїв заряду для профілю ПЯ 1

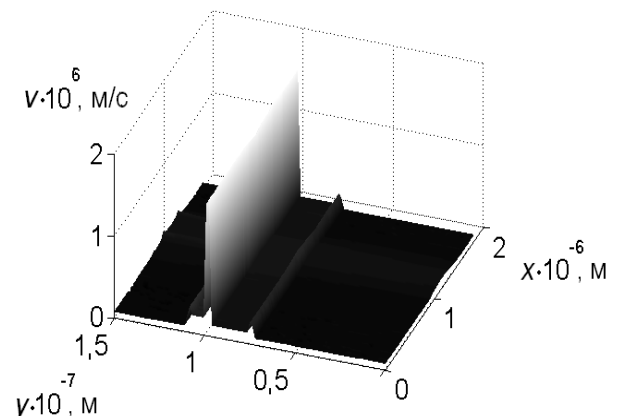


Рис. 5.15 – Розподіл швидкості носіїв заряду для профілю ПЯ 2

Також у роботах [5.25, 5.26] представлені результати розрахунку часів релаксації для основних механізмів розсіяння у напівпровідниках типа A_3B_5 і розраховані з їх врахуванням поле-швидкісні і енергетичні характеристики електронів у гетеротранзисторах з КТ.

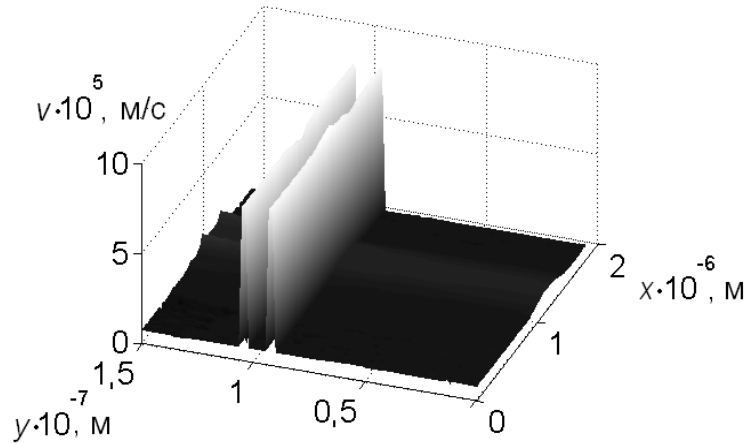


Рис. 5.16. Розподіл швидкості носіїв заряду для профілю ПЯ 3

Модельована структура польового гетеротранзистора з квантовими точками представлена на рис. 5.17.

Під час моделювання враховувалися наступні механізми розсіяння носіїв [5.17]: при розрахунку часу релаксації імпульсу – акустичне, домішкове, оптичне, полярне оптичне і міждолинне розсіяння; при розрахунку часу релаксації енергії враховувалися ті ж механізми розсіяння, але без домішкового розсіяння, яке вважається пружним.

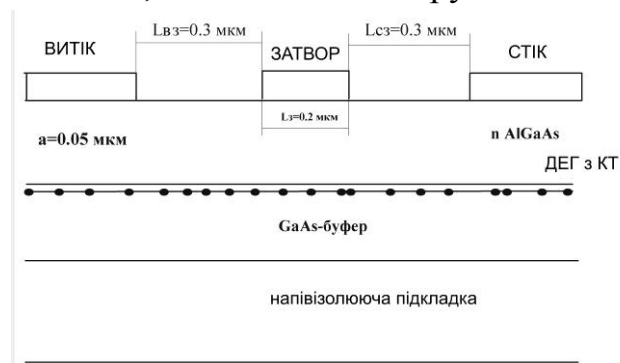


Рис. 5.17. Схемне зображення гетеротранзистора з КТ (ДЕГ – двовимірний електронний газ, a – товщина каналу)

КТ задавалися як області з вбудованим потенціалом з розмірами 60 нм у припущенні їх повної іонізації і розташовувались на границі гетеропереходу випадковим чином при ширині квантової ями 10 нм (рис.5.17).

На рис. 5.18, 5.19 наведені результати розрахунку зворотних часів (або частоти) релаксації енергії і імпульсу для міждолинного механізму розсіяння. Частота релаксації імпульсу (енергії) – це усереднена для електронного колективу кількість зіткнень, за якої імпульс (енергія) електрона повністю хаотизується.

На рис. 5.20 і 5.21 представлені результати розрахунку дрейфової швидкості носіїв заряду для структур з шириною квантової ями 10 і 40 нм відповідно. Видно, що зменшення поперечних розмірів КЯ приводить до зменшення розігрівання електронного газу і, отже, до збільшення середньої дрейфової швидкості носіїв.

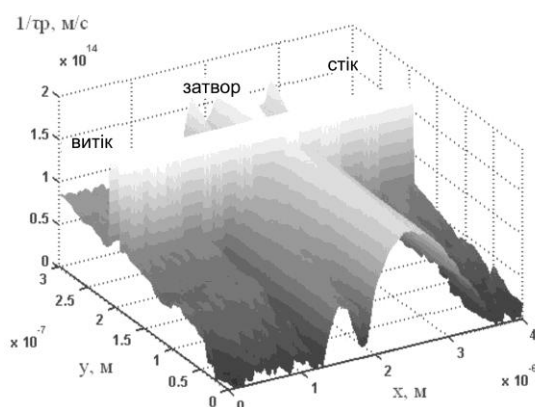


Рис. 5.18. Частота релаксації імпульсу при міждолинному розсіянні

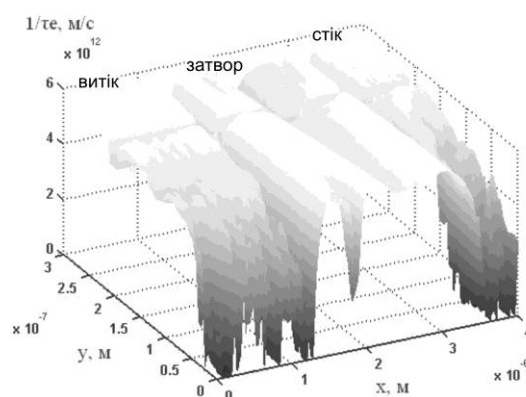


Рис. 5.19. Частота релаксації енергії при міждолинному розсіянні

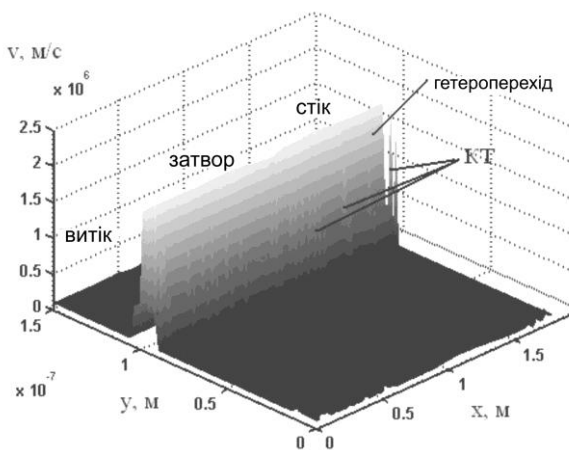


Рис. 5.20. Розподіл дрейфової швидкості носіїв у польовому гетеротранзисторі з квантовими точками, довжина затвора 0,2 мкм, ширина квантової ями 10 нм

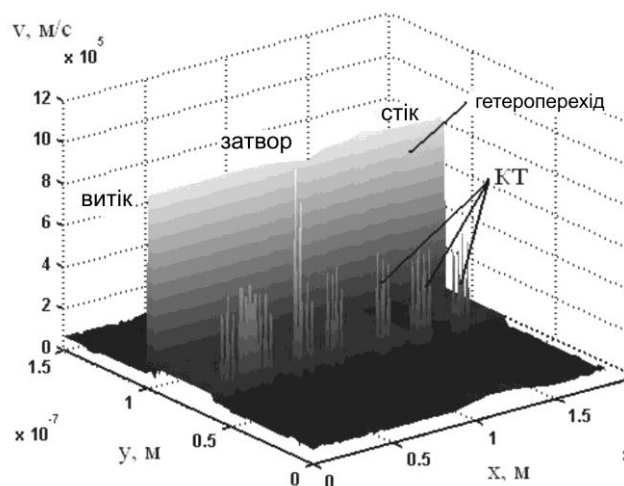


Рис. 5.21. Розподіл дрейфової швидкості носіїв у польовому гетеротранзисторі з квантовими точками, довжина затвора 0,2 мкм, ширина каналу 40 нм

Результати розрахунку зворотних часів релаксації імпульсу і енергії для транзистора з впорядкованим масивом КТ для оптичного полярного і міждолинного механізмів розсіяння представлені на рис. 5.24 – 5.27 [5.26]. Показано, що в області підвищення електронної температури частота релаксації імпульсу для міждолинного розсіяння істотно перевищує частоту релаксації імпульсу для полярного оптичного розсіяння. Зворотний час релаксації енергії для полярного оптичного розсіяння зменшується в області зростання потенціалу (рис.5.22) і високих значень температури електронного газу (рис.5.23).

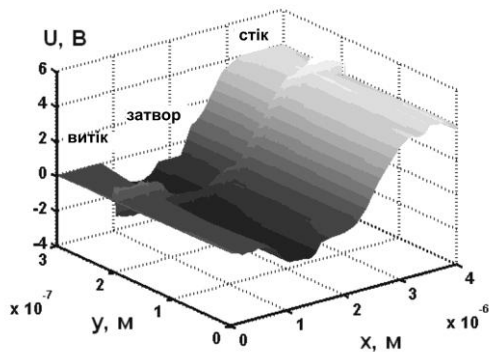


Рис. 5.22. Розподіл потенціалу

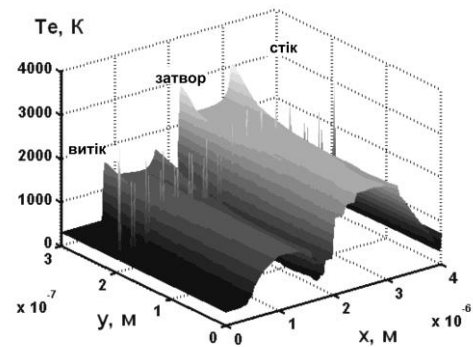


Рис. 5.23. Розподіл електронної температури

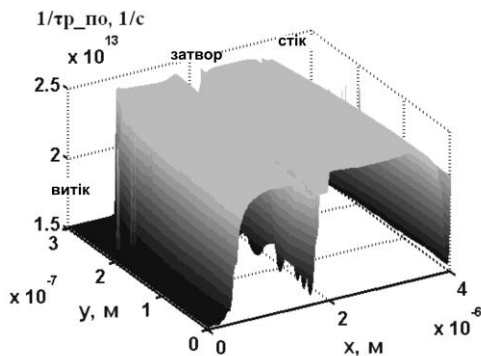


Рис. 5.24. Розподіл зворотного часу релаксації імпульсу для полярного оптичного розсіяння

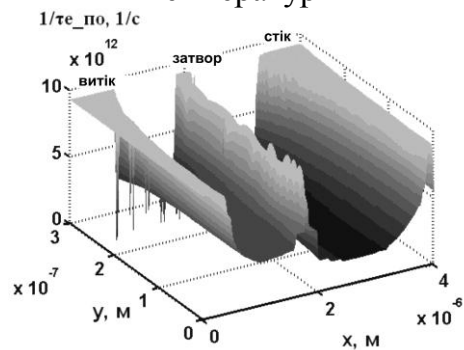


Рис. 5.25. Розподіл зворотного часу релаксації енергії для полярного оптичного розсіяння

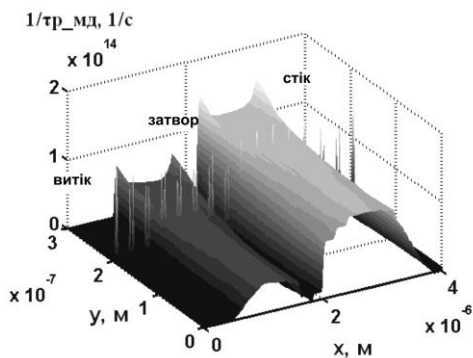


Рис. 5.26. Розподіл зворотного часу релаксації імпульсу для міждолинного розсіяння

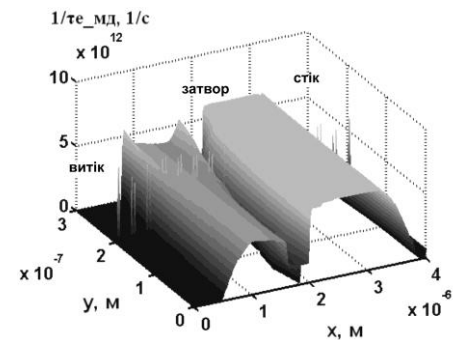


Рис. 5.27. Розподіл зворотного часу релаксації енергії для міждолинного розсіяння

З розподілів температури електронного газу і зворотного часу релаксації імпульсу і енергії для міждолинного розсіяння видно, що області сильного розігрівання носіїв (максимуми T_e) і максимальних значень $1/\tau_p$ і $1/\tau_E$ збігаються.

5.7. Ефекти розмірного квантування в гетероструктурах з квантовими точками

Розглянемо методику обрахування квантово-механічних особливостей розподілу електронів у квантовій ямі і в квантовій точці гетероструктури і проведемо аналіз результатів моделювання для різних конфігурацій гетеротранзисторів з квантовими точками.

У сильних електричних полях для структур з тонкими функціональними шарами слід враховувати дискретизацію енергетичного спектру і фермієвський характер заповнення відповідних двовимірних енергетичних підзон квантування.

У легованій гетероструктурі з концентрацією носіїв заряду порядку 10^{16} см^{-3} і вище відбувається сильна модифікація електростатичного потенціалу поблизу квантової ями, що, у свою чергу, викликає сильний зсув енергетичних рівнів квантування і перерозподіл концентрації носіїв заряду. Для двовимірного електронного газу вийти за наближення прямокутної квантової ями можливо за допомогою самоузгодженого розв'язання рівнянь Пуассона і Шредінгера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(x, y) + [\varphi(x, y) - E_0] \psi(x, y) = 0,$$

де \hbar – стала Планка; m^* – ефективна маса електрона; $\psi(x, y)$ – хвильова функція електрона; $\varphi(x, y)$ – профіль потенціалу; E_0 – енергія основного рівня квантування.

Концентрацію вільних носіїв в області квантової ями з врахуванням вигину зон можна знайти за формулою:

$$n(x, y) = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(-\frac{E_c - E_F - e\varphi(x)}{k_B T} \right),$$

де N_C – ефективна густина станів у зоні провідності; $F_{1/2}$ – інтеграл Фермі для тривимірного електронного газу; E_C – дно зони провідності; E_F – енергія Фермі.

Для розрахунку концентрації носіїв заряду в області квантової ями необхідно брати до уваги, що у двох інших напрямках електрони рухаються вільно, формуючи підзони розмірного квантування. Концентрація рухливих носіїв заряду без врахування вигину зон знаходиться інтегруванням по станам підзони з врахуванням розподілу Фермі-Дірака [5.27]:

$$n(x, y) = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] |\psi(x, y)|^2.$$

У роботі [5.28] автори звертають увагу на той факт, що вигин енергетичних зон поблизу гетеропереходу через наявність кулонівського відштовхування формує додаткові енергетичні бар'єри і приводить до появи додаткових квазірезонансних станів. Оскільки просте підсумовування двовимірних і тривимірних електронів приведе до систематичної помилки в розрахунках і ускладнень у зшиванні розв'язків, то автори [5.28] використовують модель «квантового ящика» з ідеально твердими стінками, на яких хвильова функція обертається в нуль. В рамках даної моделі концентрація носіїв заряду розраховується «усередині квантового ящика» для області ями за допомогою розв'язання рівняння Шредінгера у наближенні ефективної маси. Біля країв «ящика» і за його межами використовується квазікласичний підхід з розрахунком концентрації вільних носіїв з інтеграла Фермі з врахуванням вигину зон [5.28].

Енергії підзон розмірного квантування у наближенні прямокутної симетричної квантової ями можна визначити таким чином [5.29]:

$$\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mU_0}} = \frac{n\pi - ka}{2}.$$

Після заміни $\xi = ka / 2$, $\gamma = \frac{\hbar}{a} \sqrt{\frac{2}{mU_0}}$ отримаємо:

$$\cos(\xi) = \pm \gamma \xi, \text{ при } n - \text{ непарному}$$

$$\sin(\xi) = \pm \xi \gamma, \text{ при } n - \text{ парному.}$$

Тоді рівні енергії знаходяться як: $E = 2\xi^2 \hbar^2 / ma^2$.

Для досягнення більшої точності потрібно розв'язувати рівняння Шредінгера чисельними методами. Але для оцінки положення основного енергетичного рівня можна скористатися припущенням про «мілку»

квантову яму, для якої $U_0 \ll \hbar^2 / ma^2$ і положення основного рівня оцінюється за формулою:

$$E_0 \approx U_0 - \frac{ma^2}{2\hbar^2} U_0^2.$$

Для довільної долі алюмінію у сполучі $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ енергія електронної спорідненості буде дорівнювати: $4,07 - 1,1x$ еВ (для $x < 0,45$) і $3,64 - 0,14x$ еВ (для $x > 0,45$), а розрив зон провідності $\Delta E_c = \chi_{\text{GaAs}} - \chi_{\text{AlGaAs}} \approx 0,4$ еВ для $x = 0,35$.

Якщо гетероструктура включає неоднорідності у вигляді квантових точок, то квантування спектру електронів у них повинне враховуватися окремо шляхом обчислення положень енергетичних рівнів у відповідній КТ.

Для визначення енергетичних рівнів у сферично симетричній квантовій точці з арсеніду індію скористаємося методом, запропонованим в [5.8]. Глибина потенціальної ями у зоні провідності $\Delta E_c = \chi_{\text{InAs}} - \chi_{\text{GaAs}} = 0,83$ еВ. Скористаємося співвідношенням:

$$\sqrt{X - Y} = -\sqrt{Y} \operatorname{ctg}\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{Y}\right),$$

де $X = E / E^*$, $E^* = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2 n^2$, a – ширина потенціальної ями, $n=1, 2, 3$,

$X = U_0 / E^*$, U_0 – висота стінок ями.

Аналіз даного рівняння показує, що воно може мати розв'язок при $(n - 0,5) \leq \sqrt{Y}$. Тоді у КТ з такими параметрами буде один рівень енергії, який дорівнює $E_{\text{КТ}} = 0,036$ еВ.

Для наближення нескінченної трикутної потенціальної ями (хвильові функції електронів зосереджені усередині квантової ями) і визначення характеристик гетеропереходу з врахуванням напруги на затворі транзистора можна скористатися такою системою рівнянь [5.30]:

$$E_i = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*}\right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3\pi}{2} eF_1 \left(i + \frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}},$$

$$F = \frac{e}{\varepsilon_1} (n_s + N_{D1} l_1),$$

$$V_1 = \frac{e^2}{2\varepsilon_1} N_{D1} l_1^2 + \frac{2}{3} \frac{e}{\varepsilon_1 F_1} \sum_i n_{si} E_i,$$

$$n_{si} = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right],$$

$$\varepsilon_1 F_1 = \varepsilon_2 F_2,$$

$$E_F = V_2 - e(\phi_B - V_3 + \phi(x)) + \Delta E_C,$$

$$V_1 = V_2 + e(\phi_B - V_3 + \phi(x)) + \Delta E_C + E_{g1} - \delta_1,$$

$$V_2 = \frac{e^2}{2\varepsilon_1} [N_{D2} (a_2 - d_2 - h_\delta)^2 + N_{sp} (2a_2 - d_2) d_2 +$$

$$+ n_2 L_2 (L_2 - 2a_2) + N_\delta (2a_2 - d_2 - h_\delta) h_\delta] - q F_2 a_2.$$

Тут прийнято такі позначення (рис.5.28): V_1, V_2 – вигин зон провідності; E_i – власні значення енергії електронів ($i = 0, 1, 2, \dots$); N_{D1}, N_{D2} – концентрація донорів у відповідних матеріалах; N_{sp} – концентрація донорів у спейсері; l_1, a_2, d_2 – ширина потенціальної ями, шарів широкозонного матеріалу і спейсеру; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ – діелектрична проникність; n_{si} – поверхнева густина електронів в i -стані ($n_s = \sum_i n_{si}$); ϕ_B – висота бар'єру Шоттки; V_3 – напруга на затворі; $\phi(x)$ – поточний потенціал у каналі транзистора; $F_{1,2}$ – поперечні поля на межі гетеропереходу; E_{g1} – ширина забороненої зони у вузькозонному матеріалі; δ_1 – положення дна валентної зони відносно рівня Фермі; ΔE_C – розрив дна зони провідності на границі гетеропереходу; L_2 – відстань від границі гетеропереходу, на яку електрони проникають у широкозонний матеріал; L_2 – товщина сильнолегованого шару матеріалу спейсера; N_δ – концентрація донорів у цьому шарі. Слід врахувати, що при напруженостях електричного поля порядку 10^7 В/м для квантових ям $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}/\text{GaAs}$ з шириною порядку 10 нм основний енергетичний стан можна вважати квазістаціонарним [5.31].

На рис. 5.28 наведено енергетичну діаграму для гетеротранзистора з квантовими точками для поперечної площини каналу. У подовжній проекції КТ є чергуванням квантових ям – структурою, аналогічною надгратці. Різниця полягає у ступені обмежень носіїв заряду. Тут квантові точки мають прямокутну форму, хоча фактично у процесі зростання, у тому числі і за механізмом Странські-Крастанова, на границі гетеропереходу утворюються КТ сферичної форми, але у режимі сильних полів, як показали чисельні розрахунки, відмінності положень енергетичних рівнів в КТ у прямокутному і сферичному наближенні не є істотними.

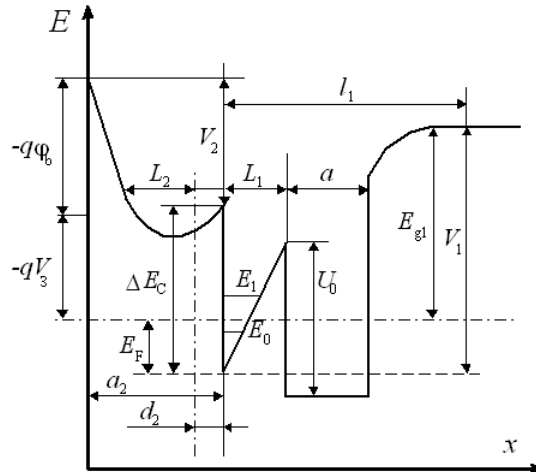


Рис. 5.28. Зонна діаграма структури гетероперехідного транзистора з КТ (U_0 – висота потенціального бар'єру квантової точки, a – її ширина)

Вплив квантових точок на процеси електронного переносу у структурі транзистора відбувається також внаслідок їх іонізації. Емісія електронів з квантових точок можлива при ударній іонізації, тунелюванні носіїв з КТ до квантової ями, а також унаслідок теплового викиду носіїв. Ймовірність теплового викиду носіїв через взаємодію з коливаннями кристалічної ґратки можна оцінити за допомогою больцмановського фактора [5.32]:

$$\delta = \exp(-\Delta E_a / k_B T), \text{ де } E_a = U_0 - E_i.$$

При глибині потенціальної ями $U_0 = 0,8 \text{ eV}$ і енергії верхнього рівня $E_n = 0,54 \text{ eV}$ ймовірність теплового викиду мала.

Прискорення електронів до порогу іонізації залежить від співвідношення двох чинників – прискорення у зовнішньому електричному полі і розсіяння при зіткненні з фононами, переважно з полярними оптичними і міждолинними. Отриманий у результаті розв'язку системи релаксаційних рівнянь розподіл електронної температури враховує ці чинники, і процеси іонізації відбувається, якщо електронна температура T_e досить висока у місці розташування КТ. При розрахунках іонізація КТ враховується у припущенні, що енергія, яка передається локалізованому в КТ носієві заряду, витрачається на подолання потенціального бар'єру і «викид» цього носія з КТ. У результаті до каналу транзистора електрон потрапляє знову з початковою енергією, яка дорівнює енергії основного рівня КТ, з якого сталася емісія.

У розрахунках враховувалися рівні із значеннями енергії 0,53 і 0,65 eV, відрахованих від дна прямокутної потенціальної ями з шириною 30 нм і

висотою 0,8 еВ. Із збільшенням розмірів КТ відстань між енергетичними рівнями стає сумірною або менше, і спектр КЯ стає квазінеперервним. Квантову точку з площею основи порядку 1 мкм² вже можна розглядати з точки зору класичної теорії. У цьому випадку на рух носіїв впливає форма зміни потенціалу в області КТ і збільшення дрейфової швидкості пов'язане з тим, що носії все одно захоплюються на якийсь час, але вже згідно класичної теорії, і, втрачаючи енергію, емітуються вже «охолодженими».

Для врахування впливу тунелювання на іонізацію КТ потрібна оцінка коефіцієнта тунелювання для трикутного бар'єру під час переходу електронів з КТ в КЯ (рис.5.28).

Обчислені положення рівнів для КТ і КЯ [5.33] в одновимірному наближенні дають збіг лише верхніх рівнів, за якого коефіцієнт проходження практично дорівнює одиниці. Для потенціального бар'єру з шириною a і при виконанні умови $\left(\frac{2m^*eE}{\hbar^2}\right)a \gg 1$, $\left(\frac{2m^*eE}{\hbar^2}\right)a|1 - E/U_0| \gg 1$ можна використовувати співвідношення при $E < U_0$ [5.8]:

$$D(E) \approx 4\sqrt{\alpha(1-\alpha)} \exp\left[-\frac{4}{3}\sqrt{\gamma(1-\alpha)^3}\right],$$

де E – напруженість електричного поля, прикладеного до затвору; U_0 – висота потенціальної сходинок [еВ]; E – рівень енергії, з якого відбувається тунелювання; $\alpha = E/U_0$, $\gamma = U_0/E_1$, $E_1 = \hbar^2/(2m^*a)$.

Ймовірність тунелювання з інших рівнів КТ є незначною. У площині розташування КТ, паралельній площині каналу, тунелювання між КТ може бути враховане у разі зв'язаних квантових точок, або наявності вертикально зв'язаних шарів КТ. В разі ізолюваних КТ коефіцієнт проходження також прагне до нуля. При подачі на затвор від'ємної напруги ширина трикутного бар'єру між КЯ і КТ зростатиме і, отже, все менше електронів зможуть тунелювати крізь нього, тоді вирішальним чинником іонізації КТ стає ударна іонізація.

Як описано у роботі [5.16], введення шару КТ до каналу гетеротранзистора сприяє квантуванню фононного спектру у трьох напрямках, тоді як на гетерограницях відбувається розділення полярно-оптичних фононів лише у поперечному до руху електронів напрямі, а додаткове розсіяння на інтерфейсних фононах приводить до практично рівних швидкостей розсіяння і в об'ємних, і в шаруватих структурах.

При розрахунку розподілень характеристик електронного газу до двовимірної моделі гетеротранзистора з КТ додана умова, за якою для відстані розташування КТ від гетеропереходу меншої, ніж $L_{\text{опт}}$, розсіяння носіїв у каналі на полярних оптичних (ПО) фононах не враховувалося. Як і слід було чекати, за умови виключення даного типу розсіяння рухливість носіїв у каналі суттєво збільшилася. Введення у канал КТ призводить до збільшення середньої швидкості носіїв внаслідок великих початкових швидкостей емітованих з КТ електронів, тим самим компенсуючи зменшення дрейфової швидкості в області стокового краю затвора.

5.8. Аналіз результатів моделювання гетероструктур з КТ

На рис. 5.29 (а) наведено ВАХ для гетеротранзистора з КТ із врахуванням усіх основних видів розсіяння, властивих таким структурам, а на рис. 5.29 (б) – без врахування розсіяння на полярних оптичних фононах. Таким чином, результати фізико-топологічного моделювання підтверджують результати експерименту, наведеного у роботі [5.16], і зростання струму із зменшенням напруги на затворі може бути пояснено саме відсутністю найбільш суттєвого з видів розсіяння із зростанням напруженості електричного поля в області між затвором і стоком, що перешкоджає, у свою чергу, насиченню дрейфової швидкості [5.34]. При моделюванні характеристик враховувалася додаткова емісія електронів з КТ унаслідок ударної іонізації.

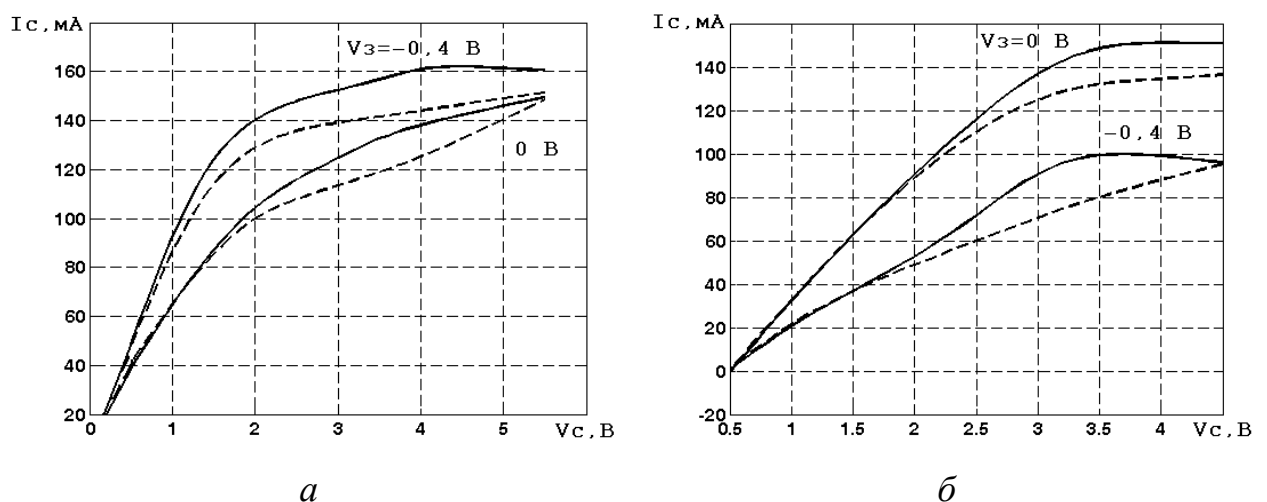


Рис. 5.29. ВАХ гетеротранзистора, суцільна лінія – ГТ з КТ, пунктирна – ГТ без КТ

Зростання струму у разі врахування впливу КТ складає 10 – 15%, що кудись більшого досягається не внаслідок збільшення концентрації рухливих носіїв, емітованих з КТ, а внаслідок збільшення середньої дрейфової швидкості. Це пояснюється тим, що емітовані з КТ електрони провідності матимуть більш значні початкові швидкості порівняно з електронами в каналі, які поки що недостатньо прискорені електричним полем.

Як показують результати, швидкість носіїв у каналі гетеротранзистора з КТ залишається практично постійною. Розраховані вольт-амперні характеристики наведено на рис. 5.30. Розрахунок струму проводився з врахуванням розподілів концентрації і швидкості носіїв у припущенні, що всі КТ іонізовані і яке є обґрунтованим через розташування КТ в області сильних електричних полів. Відстань між КТ і гетеропереходом, а також їх розміри у наведеному випадку не відповідають умові квантування полярних оптичних фононів і їх переважаючого впливу, тому в розрахунку струму враховані всі основні види розсіяння носіїв, властиві субмікронним структурам [5.35].

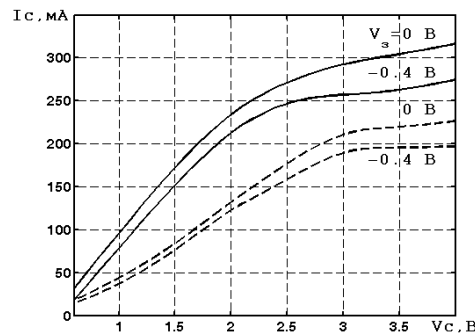


Рис. 5.30. ВАХ ГТ з КТ(суцільна лінія – ГТ з КТ, пунктирна, – ГТ без КТ)

Поряд з одноканальним представляє інтерес двоканальний гетеротранзистор. Структура двоканального транзистора і потенціальна поверхня у такому транзисторі представлена відповідно на рис. 5.31 і 5.32.

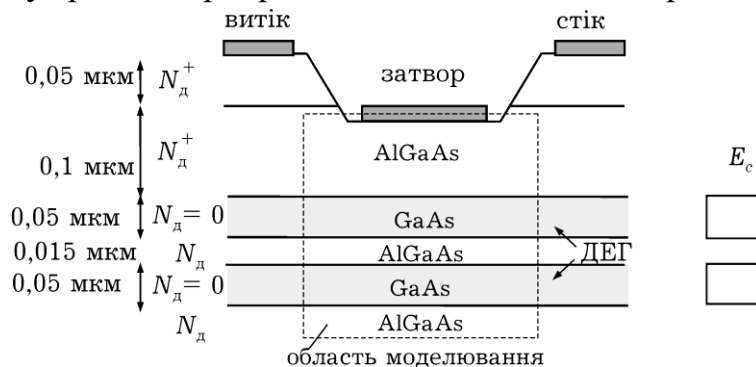


Рис. 5.31. Структура гетеротранзистора з двома гетероканалами

Переваги його використання полягають у підвищенні дрейфової швидкості носіїв у каналі внаслідок перерозподілу електронів між каналами під дією поперечної складової електричного поля затвора і збільшенні повного струму через транзистор. Якщо квантові ями тунельно не зв'язані, то перерозподілені між ними носії втрачають частину енергії на подолання потенціального бар'єру, внаслідок чого швидкість у нижній ямі і середня швидкість у структурі транзистора зростає [5.36].

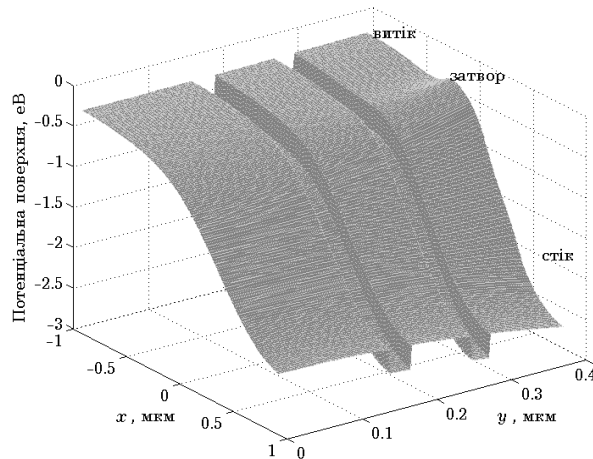


Рис. 5.32 . Потенціальний рельєф в структурі гетеротранзистора з двома гетероканалами

У разі тунельно-зв'язаних КЯ зниження або підвищення швидкості носіїв в одній з ям досягається зміною швидкості розсіяння на гетерограницях і домішках, а також, як буде показано, введенням КТ в область одного або обох каналів. Такі ефекти широко застосовуються для підвищення швидкодії логічних схем [5.8].

Введення додаткового каналу і системи квантових точок (рис. 5.33) приводить до додаткового обмеження носіїв, не дозволяючи їм «розтікатися» підкладкою [5.37].

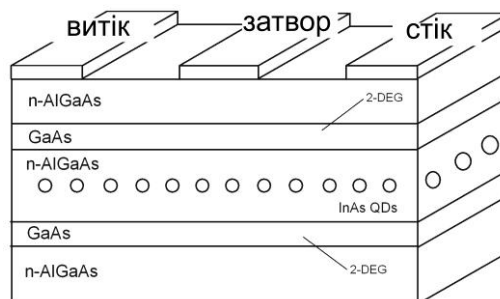


Рис. 5.33 . Структура гетеротранзистора з двома гетеро каналами і вбудованою системою квантових точок

Таким чином, навіть за однакових значень дрейфовій швидкості носіїв в обох каналах, струм через прилад зростатиме [5.38-5.42].

Описані випадки підтверджені результатами фізико-топологічного моделювання. На рис. 5.34 (а, б) наведено графіки розподілу швидкостей для одно- і двоканального гетеротранзистора відповідно [5.38].

Ширина ями одноканального і верхньої ями двоканального транзисторів складає 10 нм, а ширина нижньої ями – 45 нм. Підвищення швидкості пов'язане із збільшенням ширини нижньої ями і, як наслідок, із зменшенням розсіяння на гетерограницях. Таким чином показано, що вбудовування у гетеротранзистор з двома гетеропереходами квантових точок приводить до зростання струму каналу, а також що із збільшенням ширини КЯ швидкість носіїв у ній зростатиме через менше розсіяння носіїв на стінках ями.

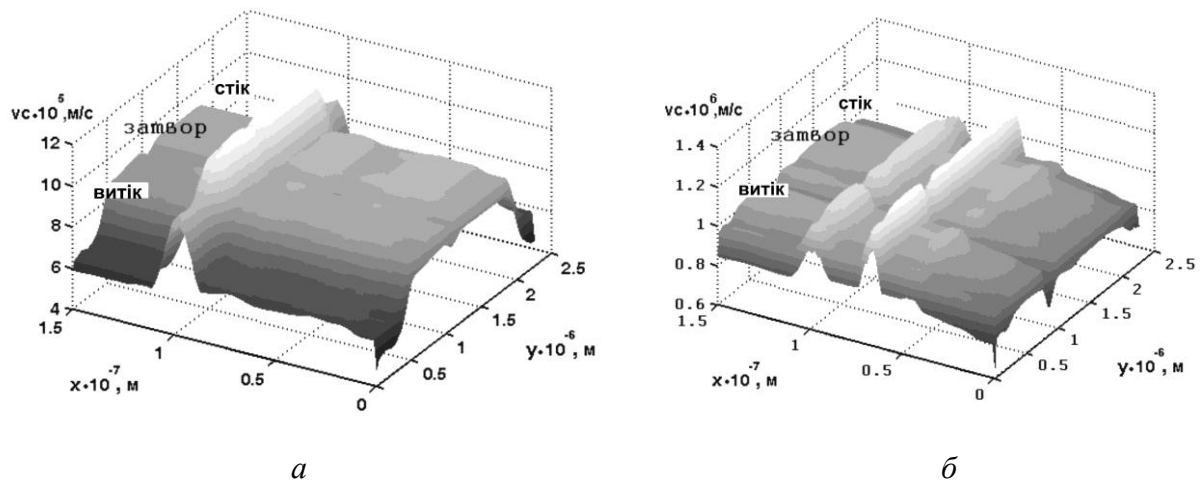


Рис. 5.34 . Розподіл дрейфової швидкості в одноканальному (а) і двоканальному (б) гетеротранзисторах

На рис. 5.35 показано розподіл дрейфової швидкості носіїв для гетеротранзистора з двома каналами, коли у нижній канал вбудовані КТ [5.43]. З графіків видно, що швидкість носіїв у нижньому каналі збільшилася приблизно на 20% порівняно з гетеротранзисторами без КТ.

Для більш повного уявлення про процеси, що відбуваються у нижньому каналі цих двоканальних транзисторів, на рис. 5.36 представлені розподіли потенціалу, напруженості електричного поля, усередненої дрейфової швидкості і концентрації у цих каналах. Різниця спостерігається в розподілах дрейфової швидкості і концентрації, причому, малий діапазон значень швидкостей обумовлений саме усереднюванням, а різниця в швидкостях обумовлена складовою по осі y .

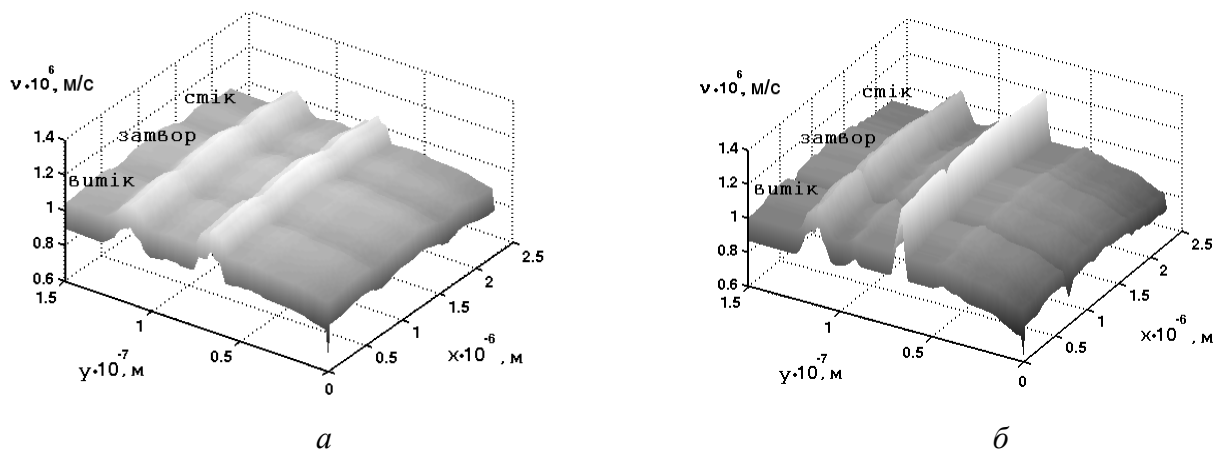


Рис. 5.35. Розподіл швидкості носіїв в двоканальному гетеротранзисторі без КТ (а) та з КТ (б)

В процесі моделювання транзисторів квантові точки мали площу основи порядку 1 мкм^2 і задавалися за допомогою плавного переходу потенціалу. У такому варіанті, з точки зору обчислювального процесу, досягається краща збіжність через відсутність різких градієнтів напруженості електричного поля, а отримані розподіли відіграють перерозподіл концентрації носіїв між квантовою ямою і квантовими точками. Це помітно з наведених розподілів, оскільки отримана концентрація носіїв у другому каналі у транзисторі з КТ нижче, ніж у тому ж каналі для транзистора без КТ.

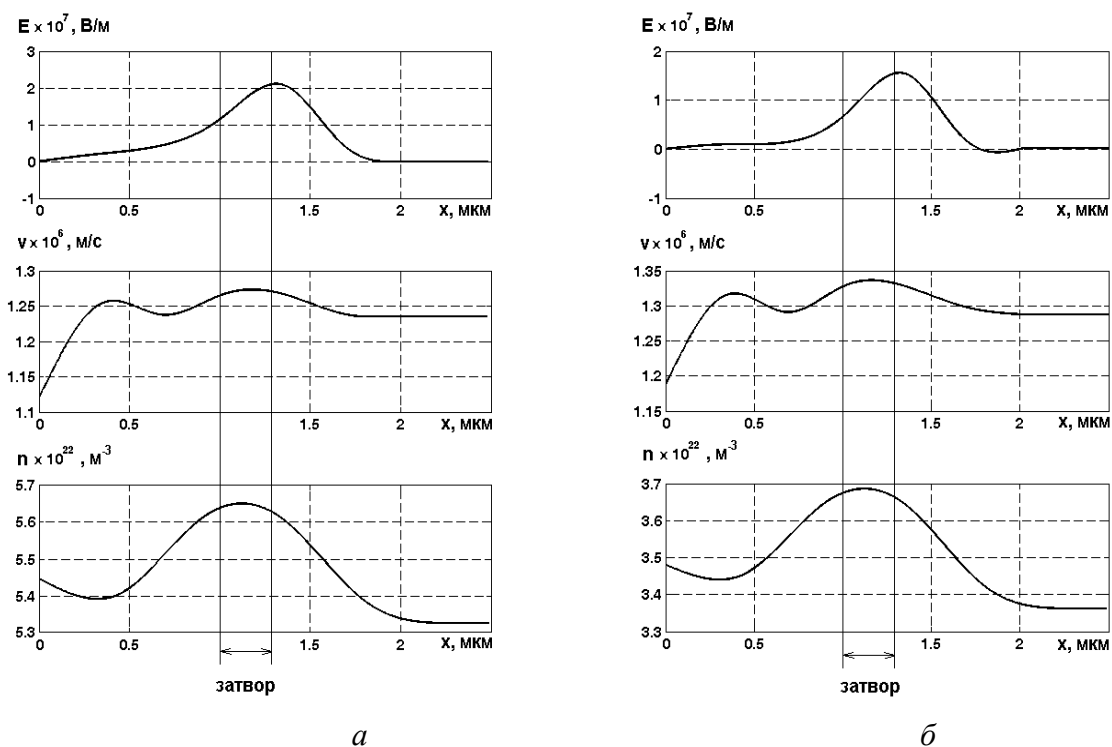


Рис. 5.36. Розподіл профілів потенціалу, напруженості електричного поля, швидкості і концентрації носіїв у двоканальному гетеротранзисторі без КТ (а) і у двоканальному гетеротранзисторі з КТ (б)

Відмінність у результатах експерименту і моделювання залежить, перш за все, від похибок використовуваних чисельних методів – процедур дискретизації і апроксимації, а також від адекватності заданих граничних умов і фізико-топологічних параметрів структури.

Для даної структури також суттєве значення має невизначеність параметрів КТ, яка пов'язана з процесами їх вирощування і неоднозначність розташування у структурі транзистора.

За однакових поверхневих концентрацій КТ можуть бути отримані різні вихідні струми, оскільки процеси іонізації КТ для кожної структури проходять по-різному.

На рис. 5.37 наведено результати розрахунку вихідного струму транзистора з концентрацією КТ у каналі $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ і порівняння з експериментом [5.15]. Розміри і форма КТ вважалися однаковими, змінювався лише спосіб їх розташування у каналі.

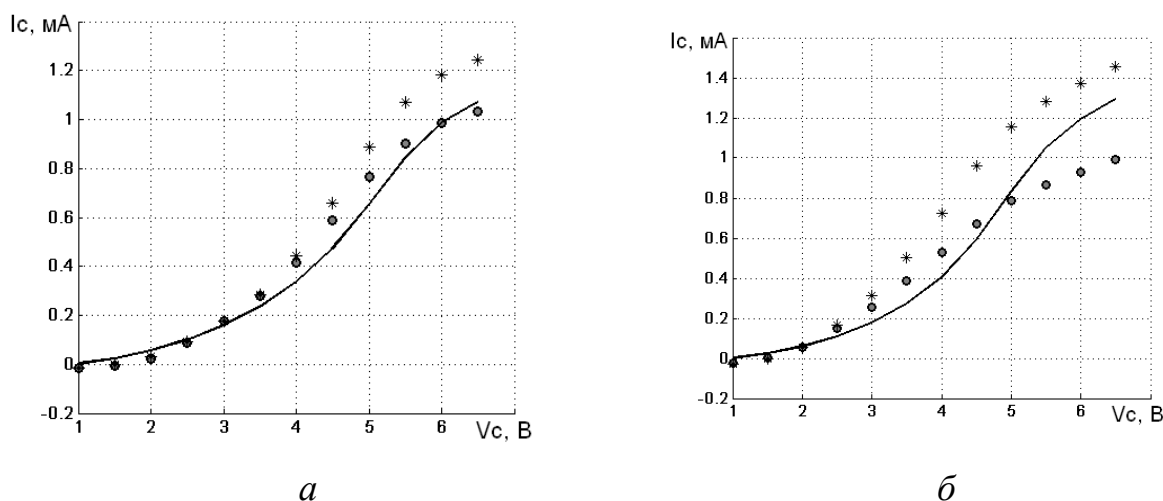


Рис. 5.37. ВАХ гетеротранзистора з КТ (суцільна лінія – експеримент, точки – результати розрахунків для концентрації КТ $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$; а) $V_g = 0 \text{ V}$, б) $V_g = -0,8 \text{ V}$).

На рис. 5.38 наведено вольт-амперні характеристики для структури без затвора [5.16] – експериментальні і розраховані.

Обчислювальні експерименти показують, що за однакових значень концентрації КТ у каналі їх розташування помітно впливає на значення вихідного струму порівняно з експериментальними даними. Таким чином, підтверджується вплив невизначеності розташування КТ на вихідні характеристики транзистора і причина їх відхилення від експериментальних даних.

Максимальне відхилення значень струму для заданої кількості інжекттованих з КТ електронів складає близько 20% при напрузі на затворі - 0,8 В. У залежності від кількості захоплюваних у КТ електронів і їх концентрації значення відносного відхилення може зменшуватися або збільшуватися.

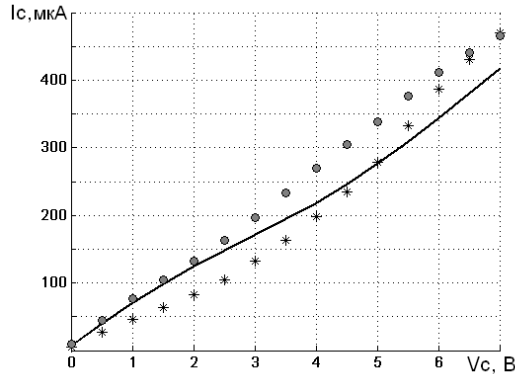


Рис. 5.38. ВАХ беззатворної гетероструктури з КТ (суцільна лінія – експеримент, точки – результати розрахунків для концентрації КТ $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$)

З отриманих результатів можна зробити ряд важливих висновків: в області слабких полів спосіб розташування КТ у каналі мало впливає на вихідні характеристики, оскільки КТ вносять несуттєвий вклад до провідності транзистора. Із збільшенням напруженості електричного поля вклад КТ у провідність каналу стає помітнішим через їх іонізацію. У сильних полях всі КТ іонізовані і неоднозначність їх розташування сильніше впливає на струм транзистора, а розходження у значеннях струмів будуть найбільшими.

При проведенні серії вимірювань вихідних характеристик тестової структури транзистора з КТ можливе отримання даних для уточнення параметрів розробленої фізико-топологічної моделі, у тому числі, і підбір параметрів КТ і їх розташування у каналах гетеротранзистора.

Представляє інтерес дослідження гетероструктур, які у поперечній площині створюють систему гетероканалів і квантових точок, аналогічно структурі надграток. Розглянемо структуру, аналогічну наведеній на рис. 5.33, доповнену системою квантових точок біля другого гетеропереходу. Таким чином, у поперечній до напрямку прискорюючого електричного поля стоку, структура представляє квантову систему «гетероперехід»-«шар КТ»-«гетероперехід»-«шар КТ». При цьому гетеропереходи формуються шарами GaAs і AlGaAs, квантові точки – на основі арсеніду індію – InAs. Для

дослідження вибрана симетрична у поперечній площині структура – геометричні розміри обох квантових ям і систем КТ однакові.

Результати моделювання потенціальної енергетичної поверхні описаної структури представлені на рис. 5.39.

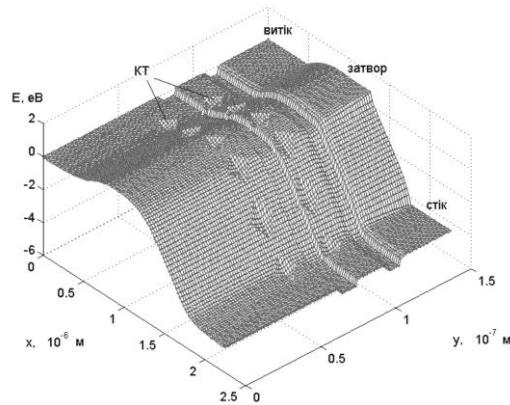


Рис. 5.39. Гетеротранзистор з двома гетероканалами і двома системами КТ

Представляє інтерес порівняння двовимірних розподілів середньої дрейфової швидкості електронів для трьох варіантів формування каналів гетеротранзисторних структур:

- гетеротранзистора з двома каналами;
- гетеротранзистора з двома каналами з системою квантових точок, вбудованих між ними;
- гетеротранзистора з двома каналами і двома системами квантових точок.

На рисунках 5.40 – 5.42 наведені розподіли середньої дрейфової швидкості для трьох вище згаданих структур.

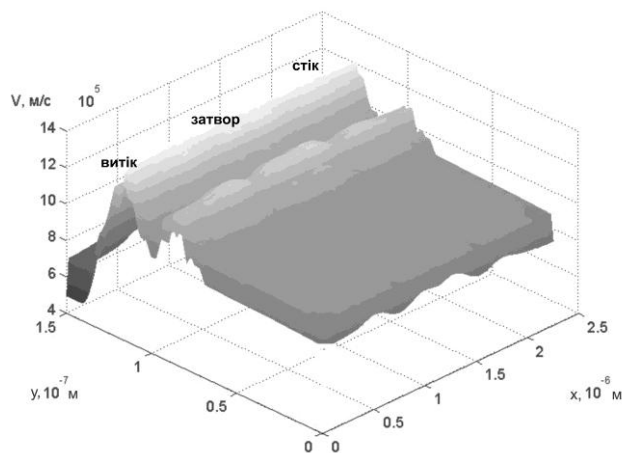


Рис. 5.40. Дрейфова швидкість електронів у гетеротранзисторі з двома квантовими ямами

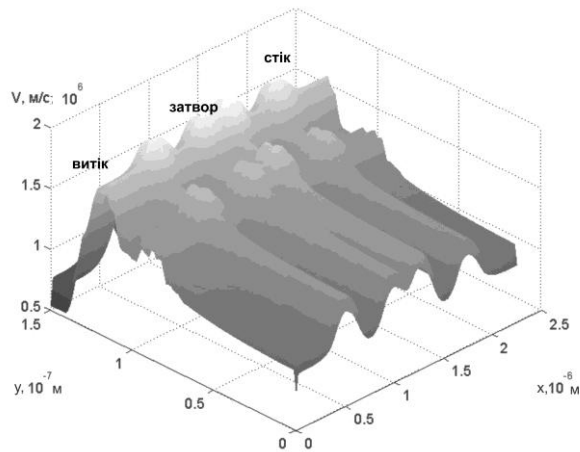


Рис. 5.41. Гетеротранзистор з двома каналами і системою КТ

Наведені результати розраховані для гетеротранзистора з довжиною затвора 0,2 мкм і електричних потенціалів на електродах транзистора: 0 В на витоку, -0,4 В на затворі і 4,0 В на стоці.

У таблиці 5.1 систематизовано дані для струму стоку і максимальних значень дрейфової швидкості для аналізованих структур.

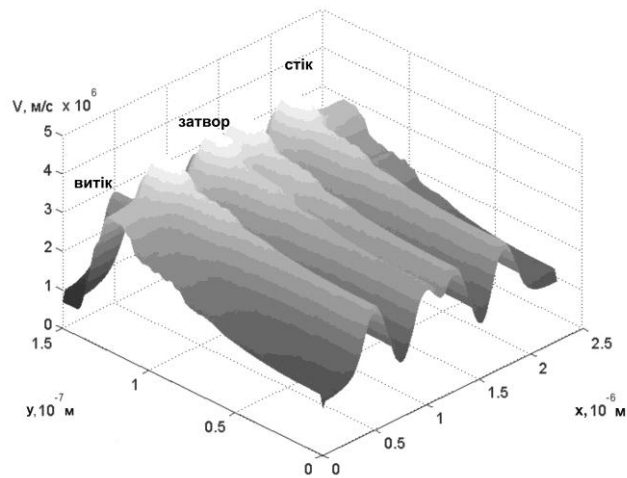


Рис. 5.42. Гетеротранзистор з двома каналами і двома системами КТ

Наведені результати свідчать про зростання як струму стоку, так і максимальних значень дрейфової швидкості з ускладненням структури гетеротранзистора. Як вже наголошувалося, додаткові гетероканал і системи вбудованих квантових точок здійснюють «охолоджуючий» вплив на електрони як унаслідок зменшення ймовірності розсіяння на полярних оптичних фононах, так і процесів «захвату-звільнення» на КТ. Це сприяє інжектуванню у канал електронів з високими початковими швидкостями і

малими значеннями енергії, що зменшує ймовірність також і міждолинного розсіювання.

Таблиця 5.1

№	Досліджувана структура	Струм стоку, мА	Максимальне значення дрейфової швидкості, м/с
1	гетеротранзистор з двома каналами	4,7	$1,2 \cdot 10^6$
2	гетеротранзистор з двома каналами і системою КТ	6,6	$1,7 \cdot 10^6$
3	гетеротранзистор з двома каналами і двома системами КТ	6,7	$4,2 \cdot 10^6$

Як показують дослідження, гетеротранзистори з вбудованими низькорозмірними системами мають особливості як частотних, підсилювальних, так і шумових характеристик [5.44-5.45].

5.9. Частотні характеристики двоканальних гетеротранзисторів з квантовими точками

Моделювання частотних характеристик активних приладів найчастіше ґрунтується на малосигнальній схемній і шумовій моделях за результатами фізико-топологічного моделювання. Представлення транзистора у вигляді шумлячого чотирьохполюсника дозволяє за відомих частотних залежностей матриці розсіювання розрахувати спектральну густину потужності шуму на вході і на виході з урахуванням їх кореляційного зв'язку. На рис. 5.43 представлена блок-схема з основними етапами схмотехнічного аналізу гетеротранзистора з квантовими точками.



Рис. 5.43. Блок-схема розрахунку схемних параметрів гетеротранзистора з КТ

Параметри схемної моделі розраховувалися для гетеротранзистора з КТ з розмірами затвора $0,2 \times 100$ мкм. Для транзистора з параметрами затвора $0,5 \times 100$ мкм результати моделювання схемних параметрів наведені у роботі [5.40].

Схемна модель двоканального гетеротранзистора з КТ наведена на рис. 5.45. Вона описує внутрішню частину транзистора без урахування впливу паразитних параметрів корпусу і металізації контактів.

Другий канал і джерело струму, яке йому відповідає, пов'язане як з носіями другого гетеропереходу, так і з електронами, емітованими з квантових точок.

За результатами фізико-топологічного моделювання були розраховані схемні параметри, параметри матриці розсіювання, коефіцієнт підсилення потужності, а також шумові параметри гетеротранзистора з квантовими точками.

Як і очікувалося, коефіцієнт підсилення потужності збільшується для гетеротранзистора з КТ, що підтверджується і для S-параметрів (рис. 5.45, 5.46) – модуль S_{21} більше у структурі із вбудованими у канал КТ. Поліпшення частотних характеристик порівняно з гетеротранзистором без КТ, а саме: коефіцієнта підсилення потужності, коефіцієнта підсилення напруги, коефіцієнта стійкості пов'язане, у першу чергу, зі збільшенням крутизни гетеротранзистора з КТ.

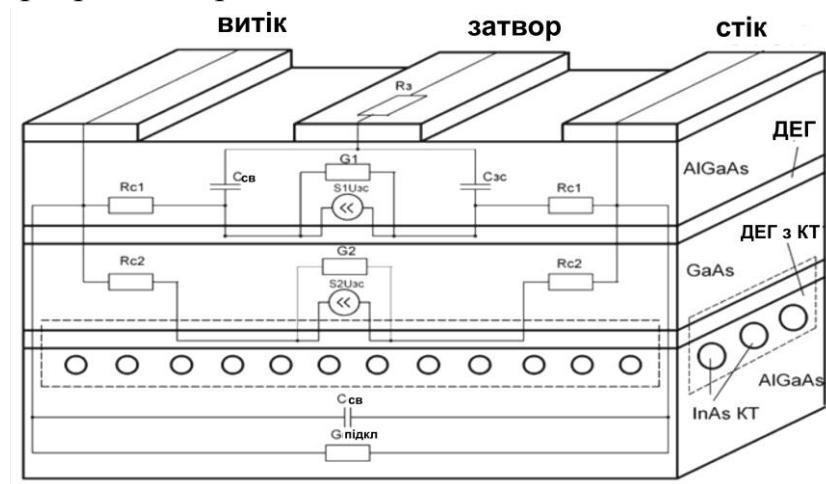
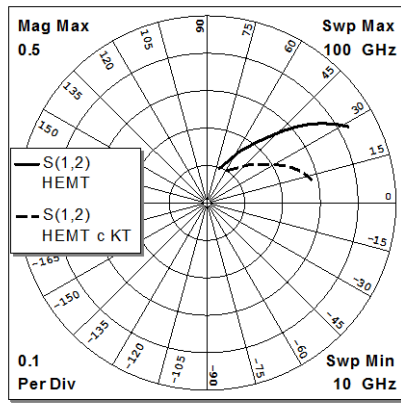
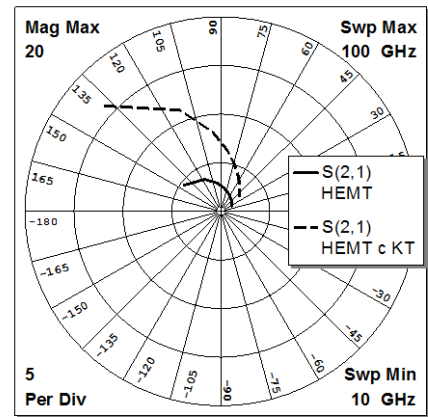


Рис. 5.44. Топологія і схемна модель двоканального гетеротранзистора з КТ

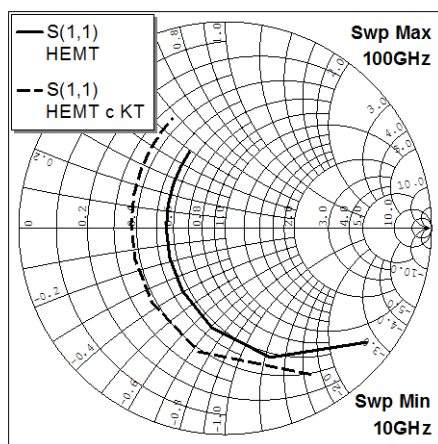


a

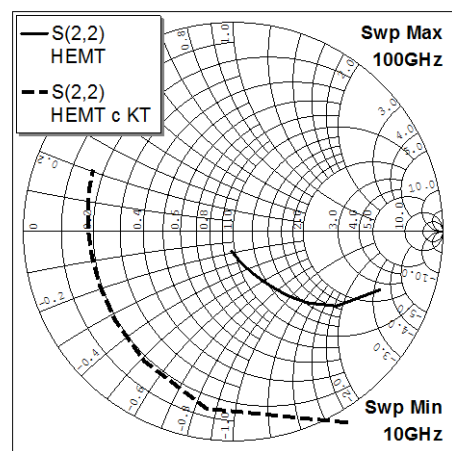


б

Рис. 5.45. Параметри S_{12} (а) і S_{21} (б)



a



б

Рис. 5.46. Параметри S_{11} (а) і S_{22} (б)

У шумовій схемній моделі двоканального гетеротранзистора з КТ враховувалися наступні локальні джерела шуму:

1. Шум каналу транзистора, пов'язаний з розігріванням електронів сильним електричним полем, розсіянням і зменшенням їх рухливості.
2. Шуми областей, що знаходяться у термодинамічній рівновазі, – шуми омичних контактів витоку, стоку, затвору.
3. Шум, наведений на затворі, зв'язаний з флуктуаціями струму каналу на високих частотах внаслідок ємнісного зв'язку із затвором (частотно-залежний шум). Це джерело корельовано з джерелом, що описує шум каналу.
4. У короткоканальних (субмікронних) транзисторах із затвором Шоттки враховується шум струмозподілу між каналом і підкладинкою. Шум струмозподілу пов'язаний з випадковим характером розподілу струму між двома колами. Для двоканального гетеротранзистора шум струмозподілу, окрім складової струму через підкладинку, пов'язаний також з випадковим характером перерозподілу електронів між

гетеропереходами. Це повинно приводити до додаткової складової шуму. Мінімізація цієї складової шуму також пов'язана з оптимальним вибором електричного режиму на затворі.

На рис. 5.47 наведені коефіцієнти підсилення потужності для двоканальних гетеротранзисторів з КТ і без КТ. Унаслідок зростання крутизни транзистора спостерігається збільшення коефіцієнту підсилення.

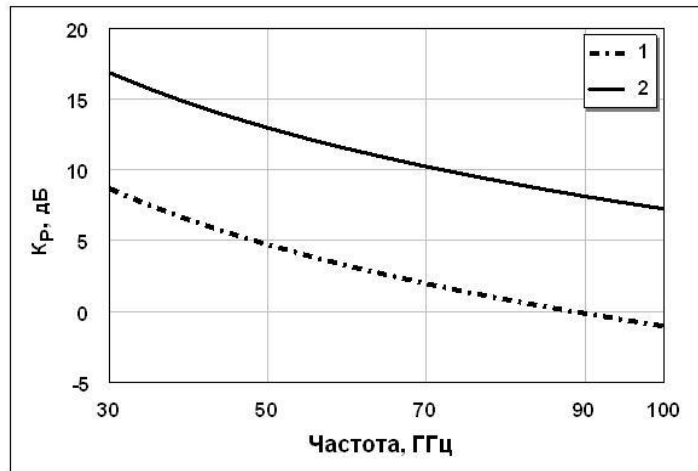


Рис. 5.47. Коефіцієнти підсилення потужності для двоканальних гетеротранзисторів з КТ(2) і без КТ(1)

На рис. 5.48 наведено отримані залежності для шумової температури двоканального гетеротранзистора з КТ і їх порівняння з результатами для одноканального гетеротранзистора з КТ.

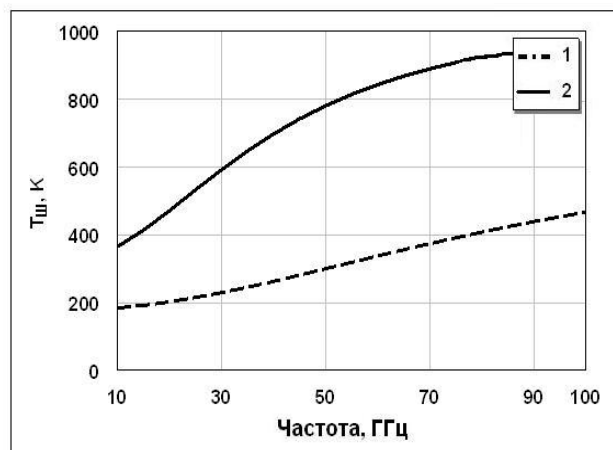


Рис. 5.48. Шумова температура для одно- (1) та двоканального (2) гетеротранзистора з КТ

Зростання шуму двоканального гетеротранзистора з КТ може бути пов'язанко із зростанням складової шуму струморозподілу між квантовими ямами і підкладинкою.

Удосконалення гетеротранзисторів як для розширення діапазону робочих частот, так і підвищення потужності, пов'язано з дослідженнями для створення нових перспективних конструкцій, наприклад, гетеротранзисторів з вертикальною структурою [5.46] на основі нітридних потрійних сполук AlGaIn/GaN. При цьому моделювання потужних субмікронних гетеротранзисторів потребує врахування ефекту саморозігрівання (*self-heating effects*) [5.47-5.48].

Контрольні запитання та вправи

- 5.1. Дайте характеристику базовим структурам субмікронних гетеротранзисторів.
- 5.2. Від яких параметрів зонної структури напівпровідників залежать розриви дна зони провідності та стелі валентної зони. Які типи гетеропереходів можливі у залежності від положення цих розривів?
- 5.3. Поясніть механізми утворення квантової ями у субмікронних гетеротранзисторах.
- 5.4. Опишіть характерну особливість структури та функціональні переваги субмікронного гетеротранзистора.
- 5.5. Які основні параметри субмікронного гетеротранзистора?
- 5.6. Якими параметрами характеризуються квантові точки у твердотільних структурах?
- 5.7. Якими рівняннями описується характеристики транзисторної гетероструктури?
- 5.8. Які обчислювальні методи і процедури застосовуються для моделювання субмікронних гетеротранзисторів?
- 5.9. Яким рівняннями описуються енергетичні стани у квантовій ямі?
- 5.10. Які особливості вольт-амперних характеристик субмікронних польового транзистора із затвором Шоттки?
- 5.11. Опишіть особливості утворення провідного каналу в гетероструктурному польовому транзисторі. Які функції виконує буферний шар?
- 5.12. Опишіть роль квантових точок, вбудованих у гетероканал транзистора.
- 5.13. Опишіть особливості транзистора з двома гетероканалами і системами квантових точок.
- 5.14. Які особливості схемної моделі транзистора з двома гетероканалами і системами квантових точок?
- 5.15. Які основні переваги транзистора з двома гетероканалами і системами квантових точок?

6. МОДЕЛЮВАННЯ ОДНОЕЛЕКТРОННОГО ТРАНЗИСТОРА (ОЕТ)

6.1 Фізичні основи та типи ОЕТ

Одноелектронний транзистор (ОЕТ) є одним із перспективних приладів твердотільної наноелектроніки [6.1], що обумовлено високою швидкістю, малим споживанням енергії. Створення так званих одноелектронних приладів відкриває широкі перспективи цифрової одноелектроніки, де один біт інформації буде представлений одним електроном. У таких приладах переміщення електрона відбувається завдяки тунелюванню. Оскільки час тунелювання електрона достатньо малий, то швидкість одноелектронних приладів дуже висока. Так, за оцінками теоретична границя швидкодії одноелектронного транзистора складає сотні ТГц (терагерц), а енергоспоживання одного приладу близьке до 3×10^{-9} Вт [6.2].

Явище одноелектронного тунелювання вперше було передбачено К.К. Лихарьовим [6.2, 6.3]. Після публікації результатів щодо експериментальних вольт-амперних характеристик окремих або невеликого числа молекул [6.4], моделювання вольт-амперних характеристик молекулярних одноелектронних транзисторів стало однією з важливих проблем сучасної електроніки.

Одноелектронний транзистор – транзистор, в основі якого лежить можливість отримання помітних значень змін струму внаслідок проходження окремих електронів через тунельний перехід. На рис 6.1 наведено схематичне зображення одноелектронного транзистора. Аналогічно польовому транзистору, одноелектронний транзистор має три електроди: витік, стік, затвор.

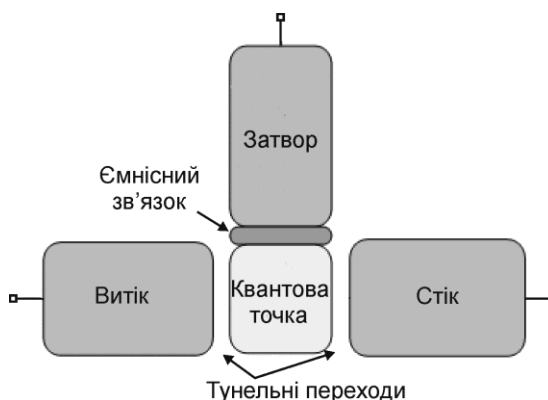


Рис. 6.1. Схематичне зображення одноелектронного транзистора

Принцип дії одноелектронного транзистора ґрунтується на явищі кулонівської блокади, схема пояснення якої зображено на рис. 6.2 [6.5]. Система представляє собою тунельні переходи метал–діелектрик–метал (МДМ). Цю систему можна розглядати як конденсатор з деякою ємністю C . Якщо перенести електрон із зарядом (e^-) з пластини $M1$ на пластину $M2$, то конденсатор виявиться зарядженим. Перенесення заряду потребує енергії (ΔE), оскільки воно відбувається проти сил взаємодії з позитивним зарядом, що виникає на пластині $M1$ (рис. 6.2, а). Ця енергія дорівнює енергії зарядженого конденсатора: $\Delta E = e^2 / 2C$. Величина ΔE являє собою енергію одноелектронного зарядження.

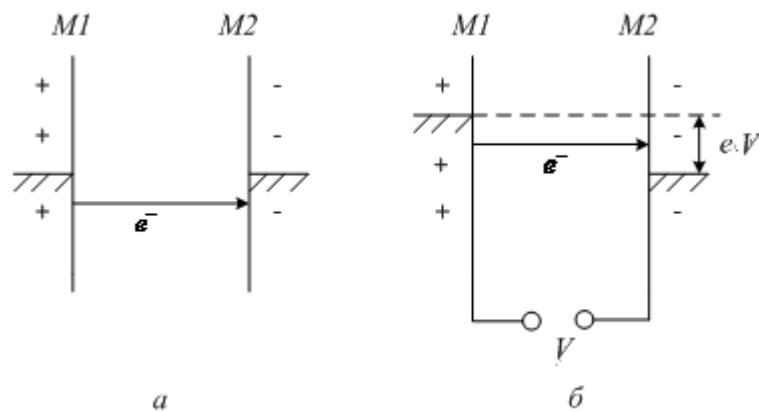


Рис. 6.2. Схема, що пояснює механізм кулонівської блокади під час тунелювання електрона [6.5]

Якщо прикласти до пластин напругу V (як це показано на рис. 6.2, б) і поступово збільшувати її, то на пластинах почнуть накопичуватися заряди. При цьому до деякого значення $V = V_k$ тунельний струм через перехід не виникає, оскільки робота джерела напруги з переміщення електрона з пластини $M1$ на пластину $M2$ залишається меншою від роботи проти кулонівських сил відштовхування. Тобто протіканню тунельного струму перешкоджає кулонівська блокада.

Електрон зможе тунелювати, коли напруга V досягне значення V_k , обумовленого співвідношенням $eV_k = e^2 / 2C$, звідки впливає й величина цієї напруги: $V_k = e / 2C$. Напругу V_k називають напругою кулонівської блокади. При досягненні значення V_k тунелює один електрон, потім знову накопичується заряд на пластинах і т. д. Електрони тунелюють через перехід по одному.

У структурах із двома тунельними переходами кулонівська блокада має особливості (у приладових структурах одноелектроніки використовують саме два тунельні переходи, щоб послабити шунтуючу дію провідників).

Конденсатор із двома тунельними переходами показано рис. 6.3, *а*. Металева гранула – квантова точка, острівцець – вміщена у діелектричне середовище (заштриховане) між двома з'єднаними металевими пластинами. Острівцець і пластини утворюють дві обкладинки складного конденсатора ємністю C . Так само, як і у попередньому випадку, перенесення електрона з пластин на острівцець (або навпаки) потребує енергії.

Схему спостереження кулонівської блокади показано на рис. 6.3, *б*. Металеві пластини B і C позначають «витік» і «стік»; O – металевий острівцець (квантова точка); заштриховані тунельні бар'єри – діелектрик.

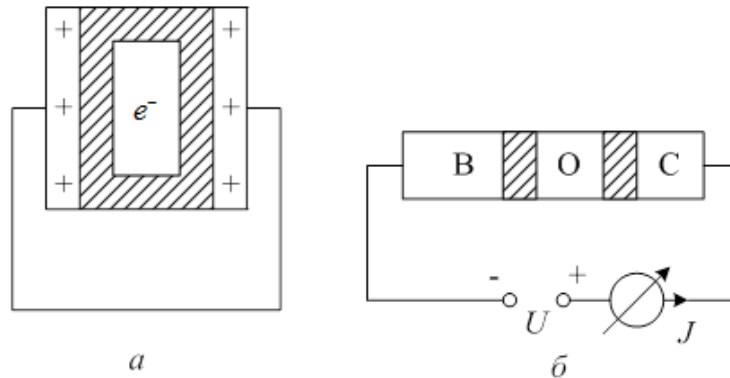


Рис. 6.3. Структура, що включає два електроди і розташований між ними у діелектричному середовищі наноострівцець, без напруги (*а*) і за її наявності (*б*) між електродами [6.5]

Енергетичні діаграми, що пояснюють ефект кулонівської блокади, зображено на рис. 6.4.

У стані рівноваги (напруга $V = 0$) рівні Фермі витoku, острівця і стоку (E_{F_B} , E_{F_0} , E_{F_C} відповідно) розміщено на одній висоті; струм у структурі відсутній. Символами E_{F_0} і $E_{F_{0-}}$ позначено рівні Фермі острівця у разі видалення з нього електрона і додавання електрона відповідно; у такому разі $E_{F_0} - E_{F_{0-}} = 2\Delta E = e^2 / C$.

Ситуацію, коли між витком і стоком прикладено невелику напругу U_1 , що не може викликати тунелювання, оскільки струм у колі дорівнює нулю, ілюструє рис. 6.4, *б*. Електрони починають тунелювати з витку на острівцець, а потім з острівця на стік за деякого критичного значення напруги V_k (рис. 6.4, *в*). Це викликає у колі струм J , що зростає зі збільшенням V .

Вольт-амперну характеристику структури показано на рис. 6.5, *а*. Прикладена напруга становить одиниці мілівольтів, одноелектронний тунельний струм – десятки наноамперів.

Коли напруга V_k відповідає рис. 6.4, *в*, електрони тунелюють і проходять через острівцець по одному. Поки на острівці є один додатковий

електрон, інший не може туди проникнути через кулонівське поле, створене електроном.

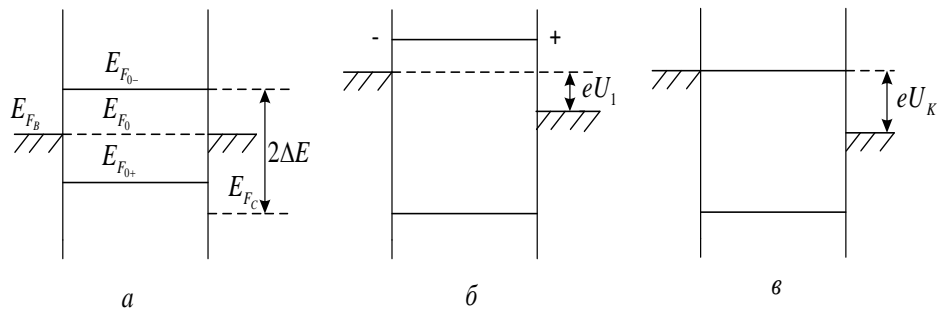


Рис. 6.4. Енергетичні діаграми, що пояснюють принцип роботи елемента на основі ефекту кулонівської блокади [6.5]

Якщо з підвищенням V між E_{F_B} і E_{F_C} виявиться кілька зарядових станів острівця, то можливі мульти електронні переходи. Але якщо один з бар'єрів буде мати велику товщину, то електрони знову будуть проходити через острівця по одному. Коли один з бар'єрів значно товщий за інший, вольт-амперна характеристика структури має вигляд, показаний на рис. 6.5, б і називається «кулонівськими сходами».

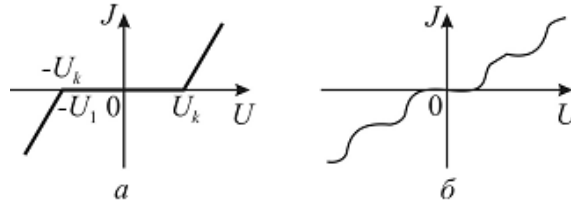


Рис. 6.5. Вольт-амперні характеристики елемента, що працює на основі ефекта кулонівської блокади [6.5]

Спостереження ефекту кулонівської блокади можливе за умови, коли енергія теплового руху електронів недостатня для подолання блокади, тобто $\Delta E \gg k_B T$. Інакше кажучи, умовою подолання блокади є нерівність $C \ll e^2 / 2k_B T$, тобто для спостереження ефекту кулонівської блокади за температури 1 К потрібна ємність $C < 9 \cdot 10^{-16}$ Ф, а за температури 300 К - ємність $C < 9 \cdot 10^{-18}$ Ф. Це означає, що блокаду можна спостерігати або за температур, нижчих від гелієвих, або за дуже малих ємностей. За звичайних умов енергія ΔE дуже мала, оскільки ємність C надто велика. Якщо температура $T = 300$ К, то пристрій типу, зображеного на рис. 6.2, б, повинен для виявлення кулонівської блокади мати пластини розміром декілька

нанометрів за товщини діелектрика близько 10 нм. Тобто довжина каналу 10 нм сумірна з довжиною хвилі де Бройля. Діапазон 30 – 50 нм (масштаб мезоструктур) варто вважати перехідним від класичної твердотільної електроніки до квантової. А це означає, що у такому каналі одноелектронного транзистора можуть спостерігатися квантово-розмірні ефекти.

Ще одна умова спостереження кулонівської блокади - провідність тунельного переходу має бути більшою за квант провідності, для того щоб у інтервалі $(E_{f1} - E_{f2})$ була хоч одна підзона, щоб електрон мав можливість тунелювати на квантову точку.

Конструкції одноелектронних транзисторів можна класифікувати за наступними ознаками [6.3]. За напрямом протікання струму конструкції діляться на горизонтальні і вертикальні. В горизонтальних пристроях напрям протікання струму є паралельним площині поверхні структури. В вертикальних – напрям струму є перпендикулярним до поверхні.

За способом формування квантових точок конструкції діляться на прилади «постійних» і «тимчасових» квантових точок. Постійна квантова точка існує постійно і являє собою найчастіше кластер (металевий чи напівпровідниковий). «Тимчасова» квантова точка створюється у двовимірному електронному газі шляхом прикладання «збіднюючих» напруг, тобто існує тільки під час роботи приладу. Крім того, пристрої на «тимчасових» квантових точках можна розділити за способом формування двовимірного електронного газу на інверсні та гетероструктурні. В інверсних пристроях двовимірний електронний газ формується в інверсних приповерхневих каналах шляхом прикладання відповідної напруги. В гетероструктурних приладах двовимірний електронний газ існує на гетерограниці.

За кількістю квантових точок прилади діляться на нульвимірні (одноточкові), одновимірні (ланцюг точок) і двовимірні (масив точок).

За управлінням параметрами квантових точок прилади діляться на некеровані (двоелектродні) та керовані (багатоелектродні, з одним або декількома затворами).

Найчастіше зустрічаються конструкції одноелектронних транзисторів на основі скануючого тунельного мікроскопа, вертикальні одноелектронні прилади на основі багат шарових структур, кремнієві одноелектронні транзистори.

6.2 . Аналіз моделей одноелектронних транзисторів

«Ортодоксальна» теорія. У цьому методі для моделювання характеристик одноелектронного транзистора використовують «ортодоксальну» теорію, і основне рівняння “*master equation*”.

«Ортодоксальна» теорія вперше була застосована Куликом Шехтером [6.5], а потім поширилась на інші системи. Теорія виходить з наступних припущень:

1) Квантуванням енергетичного спектра електронів у кластері нехтують (спектр вважається неперервним).

2) Час τ_t електронного тунелювання через бар'єр нехтовно малий порівняно з іншим характерним часом (включаючи інтервали між сусідніми тунельними подіями). Це припущення є прийнятним наближенням для тунельних бар'єрів реальних одноелектронних приладів, у яких $\tau_t \approx 10^{-15}$ с.

3) Когерентні квантові процеси, що складаються з декількох одночасних тунельних подій, не враховуються. Це припущення є точним, якщо величина опору R усіх тунельних бар'єрів системи значно більша за квант опору R_Q ($R_Q \ll R$).

Останнє співвідношення є принципово важливим для одноелектроніки у цілому. Якщо довжина металевого провідника настільки мала, що електрони “пролітають” по ньому не розсіюючись (балістичний транспорт), а його поперечні розміри сумірні з дебройлівською довжиною хвилі електронів, то опір такого провідника квантується і стає кратним $R_Q = 12,9$ кОм [6.6].

Головне положення ортодоксальної теорії може бути сформульоване наступним чином: тунелювання окремого електрона через бар'єр є завжди випадковою подією, яка відбувається з певною швидкістю Γ (тобто ймовірністю пройти бар'єр за одиницю часу), і залежить тільки від зменшення ΔE електростатичної енергії системи тунелювання, яка є результатом цієї тунельної події. В ортодоксальній теорії швидкість тунелювання (Γ) можна знайти у вигляді

$$\Gamma = \frac{1}{e^2 R t} \frac{\Delta E}{1 - e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}, \quad (6.1)$$

де ΔE – залежить від падіння напруги до тунелювання (V_f) і падіння напруги після тунелювання (V_i) [6.7] та розраховується за формулою:

$$\Delta E = \frac{e(V_f + V_i)}{2}. \quad (6.2)$$

Рівняння (6.1), (6.2) не є складними для розрахунку, однак виникають деякі технічні проблеми. У багатьох випадках є можливими декілька подій тунелювання в один і той же самий момент часу. Тому виникає необхідність розрахунку ймовірнісних статистичних станів. Для цього використовують рівняння “*master equation*” [6.8-6.10], яке дозволяє розрахувати струм через тунельні переходи одноелектронного транзистора:

$$I(n) = e[\Gamma(V) - \Gamma(-V)] = \frac{V}{R_t}, \quad (6.3)$$

де R_t – опір тунельних переходів або тунельний опір [6.6].

Рівняння (6.3) дозволяє розраховувати струм через тунельні переходи одноелектронного транзистора, простежувати зміни характеристик при зміні тих чи інших параметрів та на основі результатів аналізувати процеси, які відбуваються в одноелектронному транзисторі.

Всі вищезгадані методи мають свої переваги та недоліки, але кожен із них окремо взятий вносить вагомий внесок у дослідження одноелектронних транзисторів.

Самоузгоджена аналітична модель. Традиційним для моделювання характеристик одноелектронних транзисторів є використання напівкласичної моделі [6.11].

Загальним недоліком для напівкласичних моделей є використання експериментальних значень ємностей і опорів тунельних переходів, які не розраховуються. Результат цього – слабкий зв’язок моделей з конкретною конструкцією і електрофізичними параметрами матеріалів ОЕТ, що перешкоджає прогнозуванню електричних характеристик даного пристрою.

Більшість ОЕТ можуть бути представлені принципіальною структурною схемою, що зображена на рис.6.6. У рамках напівкласичного наближення, розраховуючи вольт-амперні характеристики одноелектронних структур, можна використовувати основне рівняння (*master equation*) [6.8, 6.9, 6.10], яке буде детальніше розглянуте нижче.

Використовуючи основне рівняння для струму через тунельні переходи, можна записати:

$$\begin{aligned} \partial p(n) / \partial t = & \left(\bar{I}_1(n-1) + \bar{I}_2(n-1)p(n-1) \right) + \left(\bar{I}_1(n+1) + \bar{I}_2(n+1) \right) \times \\ & \times p(n+1) \left(\bar{I}_1(n) + \bar{I}_1(n)p(n) - \bar{I}_2(n) \right) p(n). \end{aligned} \quad (6.4)$$

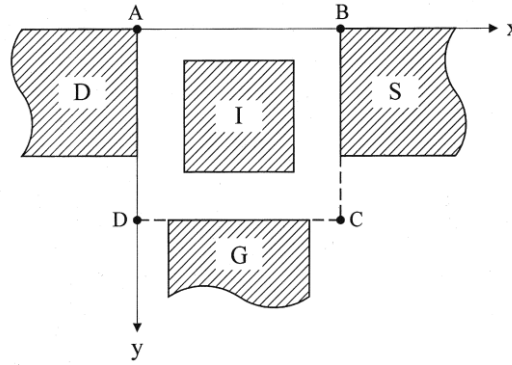


Рис. 6.6. Структура модельованого пристрою D – стік, I – “острівець”, S – витік, G – затвор

Тоді повний струм через структуру буде мати значення:

$$I = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} p(n) (\bar{I}_1(n) - \bar{I}_1(n)) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} p(n) (\bar{I}_2(n) - \bar{I}_2(n)). \quad (6.5)$$

У формулах (6.4), (6.5) $\bar{I}_1(n)$, $\bar{I}_1(n)$ – струми через тунельний перехід стоку у прямому і зворотному напрямках; $\bar{I}_2(n)$, $\bar{I}_2(n)$ – струми через тунельний перехід витіку; $p(n)$ – ймовірність перебування n надлишкових носіїв на островці.

Напруга на тунельних переходах знаходиться з урахуванням результатів розрахунку розподілу електростатичного потенціалу і значень контактних різниць потенціалів в структурі. Опори знаходяться згідно відомих співвідношень [6.12].

У припущенні нехтування впливу магнітного поля на роботу транзистора, електростатичний потенціал знаходять із розв’язку рівняння Пуассона, у якому просторовий заряд визначається тільки середньою густиною надлишкових зарядів безпосередньо на островці. Воно розв’язується в активній області транзистора між стоком, витіком і затвором (двовимірною областю ABCD на рис. 6.6). Як граничні використовують умови Діріхле на контактах і умови Неймана на вільних границях.

Метод функції Гріна [6.13] Одним із найефективніших методів є метод з використанням функції Гріна для неврівноважених процесів. За допомогою цієї функції легко знайти розв’язок рівняння Шредінгера і ця функція добре узгоджується з розв’язком рівняння Пуассона, оскільки

перенос заряду через робочий канал описується рівнянням Шредінгера, а вплив бар'єру на цей процес описується рівнянням Пуассона. .

6.3. Модель ОЕТ на основі молекули фенілдитіолу

Формалізм Ландауера застосовується для опису повністю когерентного транспорту у пристроях, розміри яких лежать у субмікронному і нанометровому діапазоні [6.14]. Основну ідею формалізму Ландауера можна зрозуміти, якщо розглянути одновимірну напівпровідникову структуру типу квантової нитки. Якщо така нитка достатньо коротка (тобто її довжина менша за довжину вільного пробігу електрону), то рух електронів буде відбуватися без випадкових взаємодій, тобто без розсіювання, і перенесення заряду матиме балістичний характер. Для формалізму Ландауера розглядається система, у якій така квантова нитка з'єднана ідеальними контактами (тобто такими, у яких повністю відсутні процеси розсіювання) з двома резервуарами макроскопічних розмірів (які характеризуються електрохімічними потенціалами μ_1 і μ_2), між якими прикладена низька напруга V для забезпечення протікання струму через квантову нитку. У результаті між резервуарами виникає різниця потенціалів eV , яка дорівнює $(\mu_1 - \mu_2)$. Величина струму I , що протікає при цьому по нитці, дорівнює добутку концентрації електронів N на швидкість електронів v і на їх заряд:

$$I = eNv. \quad (6.6)$$

У системі, де має місце одноелектронний транспорт, між макроскопічними резервуарами вбудована квантова точка. Розміри квантової точки обмежені у трьох вимірах так, що вони менші за довжину середнього вільного пробігу електронів, а це дозволяє вважати транспорт електронів балістичним.

Отже для одноелектронного транзистора також можна застосувати формалізм Ландауера, який дозволить визначити величину струму, що протікає через квантову точку.

У молекулярному одноелектронному транзисторі квантовою точкою є молекула. Квантова точка у вигляді молекули має розміри на порядок менші ніж розміри квантових точок, які використовуються у напівпровідникових, гетероструктурних транзисторах, що дозволяє вивчати багато мезоскопічних і багаточастинкових ефектів в ОЕТ за більш високих температур.

Вимірювання струму (I) в залежності від напруги (V) можна провести, якщо з'єднати молекулу з двома металевими контактами так, як це показано на рис.6.6. Більшість експериментів до цього часу через погані контакти молекул з електродами проводяться без участі затвору. Для того, щоб зрозуміти і пояснити ВАХ молекулярного одноелектронного транзистора, спочатку потрібно розглянути саме такий простий приклад протікання струму через квантову точку без участі затвору (рис.6.7). В [6.4] наведено опис простої моделі електронного транспорту – моделі діода. Взявши за основу дану модель діода, можна розробити модель нового об'єкту - транзистора, структура якого відрізняється від діода тим, що містить ще один електрод. Саме така модель описана нижче.

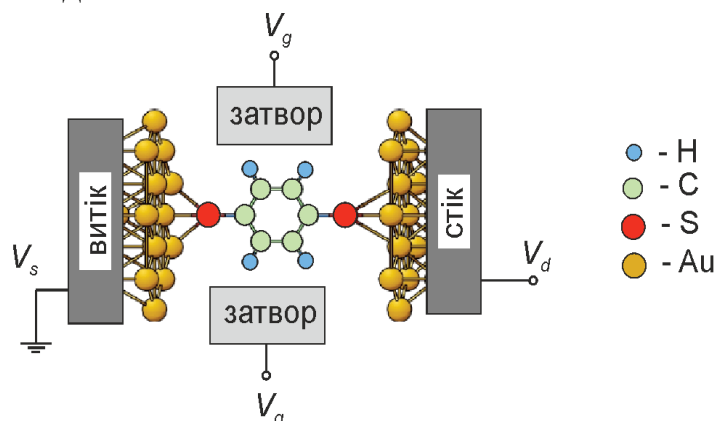


Рис. 6.7. Структура молекулярного транзистора, побудованого на молекулі фенілдитіолу

Модель транзистора, зображеного на рис.6.7, якісно пояснює основні фактори, що впливають на ВАХ, у тому числі кулонівську блокаду і розширення енергетичних рівнів, пов'язаних з двома контактами. Якщо врахувати ці ефекти, можна отримати більш реалістичні ділянки ВАХ.

Для розуміння залежності струму (I) від напруги (V) для молекулярного провідника, потрібно спочатку розглянути діаграму енергетичних рівнів і знайти енергії Фермі.

Розглянемо спочатку молекулу, яку розміщено між двома металевими контактами, і слабо з ними зв'язану. Енергетичну діаграму такої системи зображено на рис. 6.8. Її можна отримати, якщо прийняти для електродів та молекули спільний рівень вакууму.

Для потрапляння електрона з металу до молекули або з молекули у метал потрібно відносно багато енергії. Перенесення заряду призводить до зміни електростатичного потенціалу всередині молекули, до збурення енергетичних рівнів молекули та виникнення контактної різниці потенціалу (E_k), як показано на рис.6.9.

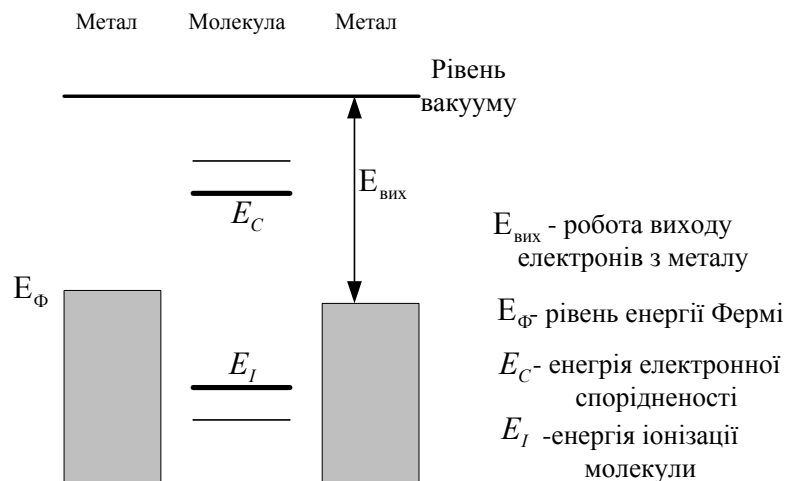


Рис. 6.8. Енергетична діаграма контакту метал-молекула-метал

На даний час для опису транспорту, пов'язаного з переносом заряду в молекулі, використовують опис у термінах *HOMO-LUMO* рівнів («*highest occupied molecular orbital*» і «*lowest unoccupied molecular orbital*» відповідно). Щоб відбувся транспорт або перехід електронів, зв'язок молекула-метал повинен бути досить сильним. Перехід електронів залежить від відносної величини енергії зарядки одним електроном (U) і розширення енергетичного рівня (Γ). Як правило, якщо $U \gg \Gamma$, можна очікувати, що структура знаходиться у режимі кулонівської блокади, в іншому випадку вона адекватно описується наближенням самоузгодженого поля. Важливо відзначити: щоб структура була у режимі кулонівської блокади, її контакти повинні бути слабо зв'язані з молекулою. Навіть якщо тільки один з контактів сильно з'єднаний з молекулою, можна очікувати, що $\Gamma \sim U$, і при цьому система добре описується наближенням самоузгодженого поля.

Теорія молекулярних орбіталей (HOMO-, LUMO-рівні). Для кращого розуміння молекулярних орбіталей розглянемо природу ковалентних зв'язків з точки зору квантових властивостей матерії. Повний і детальний опис природи хімічних зв'язків – складне завдання. Тому для розв'язку практичних задач необхідно оперувати спрощеною, але разом з тим зрозумілою моделлю, яка добре узгоджується з експериментально отриманими даними.

У будь-якому зразку із будь-якого матеріалу є велика кількість атомів, зосереджених відносно близько один до одного так, що їх орбіталі перекриваються, що може бути описано хвильовими функціями електрона. Як будь-яка функція, хвильова функція має додатну і від'ємну область значень, крім того хвильова функція описує коливання, а це означає, параметрично залежить від амплітуди хвилі. Відповідно до [6.15] орбіталі

називаються перекритими, якщо два атоми наближаються один до одного настільки, що одна із орбіталей кожного з них має значну амплітуду у просторі, загальному для двох атомів.

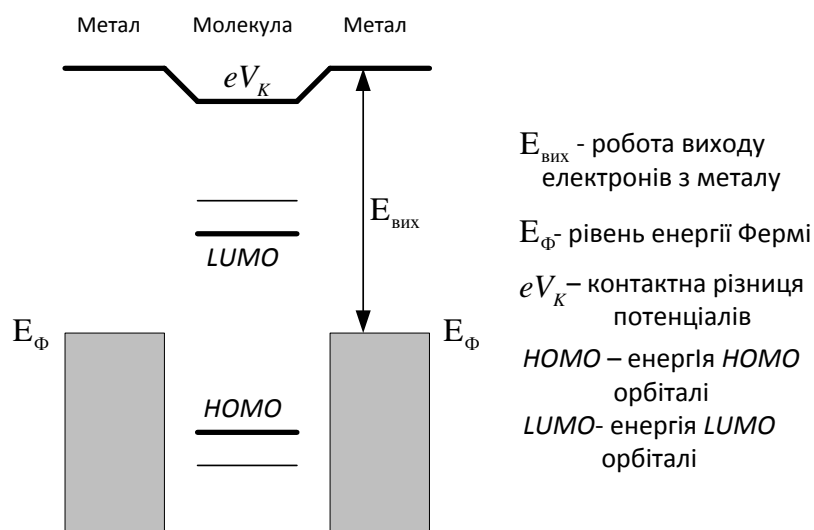


Рис. 6.9. Енергетична діаграма контакту метал-молекула-метал при зміні контактної різниці потенціалів

Перекриті орбіталі можна розглядати, як нові, так звані молекулярні орбіталі, на яких можуть бути зосереджені не більше двох електронів. Із всіх молекулярних орбіталей виділяють наступні:

– НВМО (*LUMO*) – найнижча вільна (вакантна, незайнята) молекулярна орбіталь. Енергія НВМО молекули, згідно теореми Купманса [6.15], приблизно дорівнює енергії спорідненості електрона.

– НЗМО (*HOMO*) – найвища зайнята електронами молекулярна орбіталь, енергія якої за теоремою Купманса [6.15] для молекули дорівнює потенціалу іонізації, взятому з протилежним знаком.

Найбільш об'єктивні значення потенціалів іонізації можна знайти з допомогою методу фотоелектронної спектроскопії. У цьому методі пари органічної речовини опромінюють у глибокому вакуумі гелієвою лампою з енергією фотонів $h\nu = 21,2\text{eV}$. Цієї енергії достатньо для "вибивання" з органічної молекули валентних електронів, що знаходяться на зайнятих молекулярних орбіталях.

При цьому теорема Купманса звучить наступним чином: якщо видалити з орбіталі один електрон (іонізувати атом або молекулу), то енергію іонізації системи можна наближено записати як $I = h\nu - E_{\text{ел}}$, де $E_{\text{ел}}$ – енергія електронів, які видаляються з орбіти, $h\nu$ – енергія фотонів. І цю енергію

згідно теореми Купманса можна прирівняти до значення енергії, що відповідає відповідній занятій молекулярній орбіталі.

Електронна спорідненість органічних молекул вимірюється методом електронної трансмісійної спектроскопії. У цьому методі пари органічної речовини у глибокому вакуумі “бомбардують” електронами, що мають змінну енергію. Коли енергія електронів “бомбардування” виявляється рівною значенню енергії вільної молекулярної орбіталі, спостерігається захват електрона. При цьому в електронному трансмісійному спектрі реєструється резонансна лінія, за положенням якої можна судити про величину електронної спорідненості органічної молекули. Згідно з теоремою Купманса, значення електронної спорідненості прирівнюється до значення енергії відповідної вільної молекулярної орбіталі, взятої з оберненим знаком.

Вплив контактів на розширення рівнів молекули. Зі сказаного вище зрозуміло, що сила зв'язку молекул з контактами відіграє важливу роль у визначенні струму. Чим сильніший зв'язок, тим більша величина струму. Кількісною мірою зв'язку є розширення молекулярних енергетичних рівнів Γ (рис.6.10). Це розширення можна пов'язати з часом $\Gamma = \hbar/\tau$, де τ — час, протягом якого електрон знаходиться на енергетичному рівні молекули, доки не перейде на контакт. У цілому розширення Γ може бути різним для різних енергетичних рівнів. Для структури загальне розширення є сумою двох розширень контактів $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$.

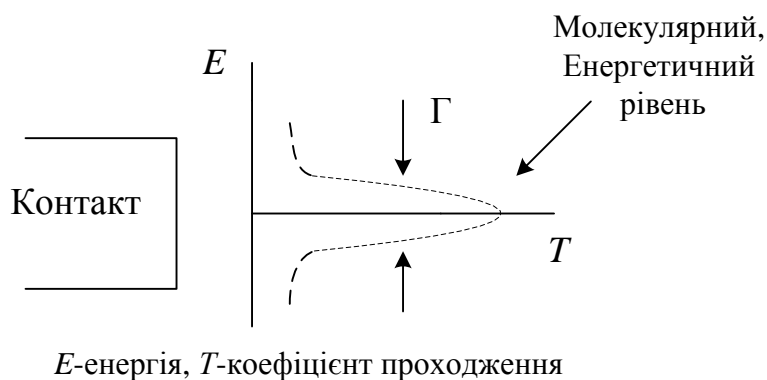


Рис. 6.10. Ілюстрація розширення молекулярного енергетичного рівня

Баланс струмів. Протікання струму зумовлюється нерівноважною ситуацією, коли різні електроди (у даному випадку - витік і стік) мають різні електрохімічні потенціали μ_1 та μ_2 (рис. 6.11.).

Наприклад, якщо для стоку по відношенню до витоку прикладають додатну напругу V , то стік має електрохімічний потенціал нижче, ніж на стоці $eV : \mu_2 = \mu_1 - eV$. Контакти витоку і стоку таким чином, характеризуються різними функціями Фермі, і кожен електрод “прагне”

привести молекулу до рівноваги з самим собою. Витік “виштовхує” електрони для встановлення рівноваги з собою, стік “тягне” електрони у своєму напрямку також для встановлення рівноваги. Але рівновага ніколи не досягається. Пристрій, таким чином, змушений балансувати між двох резервуарів. Для опису цього процесу балансування можна використати кінетичне рівняння, яке відстежує вхідні і вихідні потоки електронів від кожного з електродів.

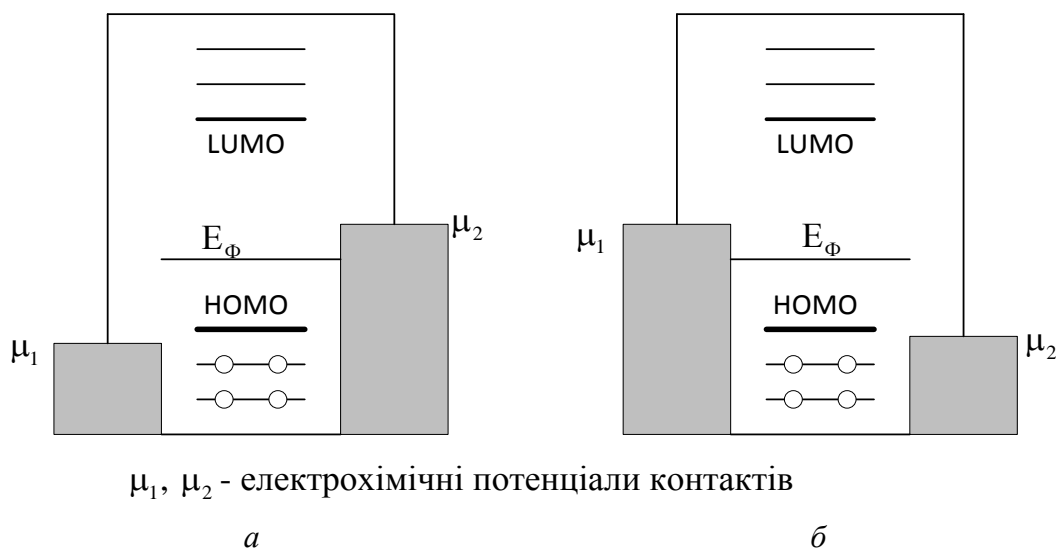


Рис. 6.11. Енергетичні діаграми структури метал-молекула-метал при підключенні до другого контакту додатної (а) та від’ємної (б) напруги

Щоб легше зрозуміти процес балансування та процеси протікання струму розглянемо просту однорівневу систему. Нехай енергія молекули E лежить між електрохімічними потенціалами двох контактів (рис. 6.12). Електрон, що знаходиться на цьому рівні може перейти на контакти 1 і 2 з швидкістю переходу електронів Γ_1 / \hbar , Γ_2 / \hbar відповідно.

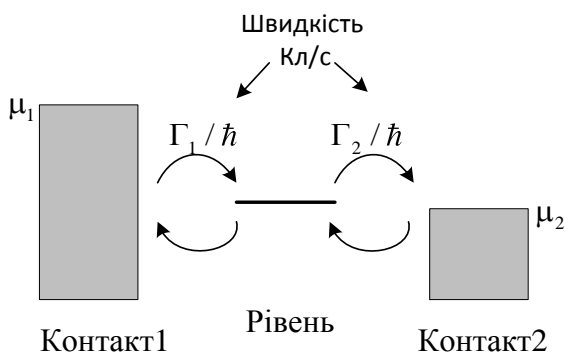


Рис. 6.12. Зображення кінетичного балансу

У рівноважному стані, середнє (у часі) число електронів на будь-якому енергетичному рівні, як правило, не ціле, а визначається функцією Фермі:

$$f(E, \mu) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - \mu}{k_B T}}}, \quad (6.7)$$

Якби електрон перебував у рівновазі з контактом 1 або 2, то число електронів, що займають рівень було б рівне N_1 або N_2 відповідно:

$$N_1 = 2f(E, \mu_1), \quad N_2 = 2f(E, \mu_2). \quad (6.8)$$

Множник «2» враховує два можливі напрямки спіну.

За відсутності рівноваги, число електронів N на рівні E буде лежати в межах між N_1 та N_2 . Щоб визначити це число, запишемо стаціонарне кінетичне рівняння для струму на лівому переході [6.16]:

$$I_L = \frac{e\Gamma_1}{\hbar} (N_1 - N). \quad (6.9)$$

На правому переході:

$$I_R = \frac{e\Gamma_2}{\hbar} (N - N_2), \quad (6.10)$$

де Γ_1 (Γ_2) – розширення рівня енергії завдяки витіканню через перший (другий) контакт; N – кількість електронів у стаціонарному стані.

Стаціонарний стан математично еквівалентний рівності $I_L = I_R$, звідки:

$$N = 2 \frac{\Gamma_1 f(E, \mu_1) + \Gamma_2 f(E, \mu_2)}{\Gamma_1 + \Gamma_2}, \quad (6.11)$$

$$I = \frac{2e}{\hbar} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} (f(E, \mu_1) - f(E, \mu_2)). \quad (6.12)$$

Рівняння (6.12) виходить з елементарної моделі, воно служить для ілюстрації основного процесу — протікання струму. З цього рівняння видно, якщо $f(E, \mu_1) = f(E, \mu_2)$, то струм протікати не буде. Якщо рівні енергії молекули значно нижчі за електрохімічні потенціали μ_1 і μ_2 функції розподілу Фермі-Дірака дорівнюють $f(E, \mu_1) = f(E, \mu_2) = 1$.

Струм протікатиме тоді, коли рівень буде знаходитися між μ_1 і μ_2 , звідки й випливає умова протікання струму $f(E, \mu_1) \neq f(E, \mu_2)$.

Таким чином, струм є результатом відмінностей у станах між контактами. Щоб існувала така відмінність, на одному контакті повинно бути більше електронів (ніж N), які займають рівні, щоб постійно виштовхувати їх від себе. У той час на другому контакті повинно бути менше електронів, щоб постійно “витягувати” електрони на себе. Кінцевим результатом буде безперервна передача електронів від одного контакту до іншого.

6.4. Аналіз результатів моделювання ОЕТ

Структура одноелектронного транзистора, де активною частиною є квантова точка на основі молекули фенілдитіолу, зображена на рис. 6.16. Дана молекула представляла собою молекулу фенілу, яка може бути згрупована у дві підсистеми. Перша підсистема містить групу тіолу SH на одному кінці, друга – на двох кінцях. Ці молекули утворюють самоорганізовані моношари (COM) на поверхні Au (111) за допомогою зв'язку сірки із золотом. Докладно створення моношарів молекули фенілдитіолу опубліковано у роботі [6.17].

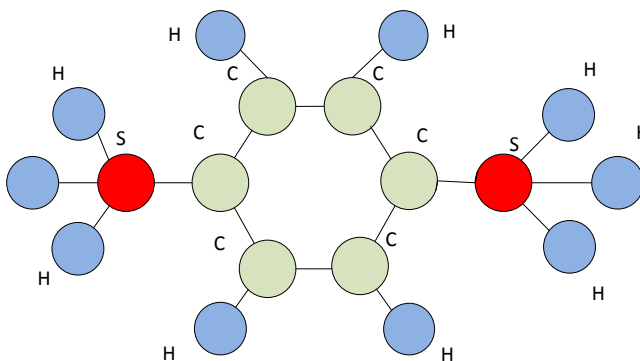


Рис. 6.13. Ілюстрація геометрії молекули фенілдитіолу:
S-атоми сірки, C-атоми вуглецю, H-атоми водню

Відповідно до [6.18] розведений розчин, що містить молекулу фенілдитіолу з групою ($-SH$) поміщали на чисту поверхню золота Au(111). У разі взаємодії молекули фенілдитіолу з поверхнею золота, Au витісняє водень групи ($-SH$) і утворює ковалентний зв'язок з молекулою [6.19]. Таким чином, плівка із золота може бути використана як один з контактів для вимірювання електричних характеристик. Роль другого контакту відіграє голка силового тунельного мікроскопа (СТМ), з допомогою якої можна виміряти вольт-амперну характеристику транзистора. Отже молекула має один кінець,

прикріплений хімічним зв'язком до підкладки золота, а інший кінець з'єднаний змінним СТМ. Модель такої системи одномолекулярного транспорту може бути зображена так, як показано на рис. 6.14.

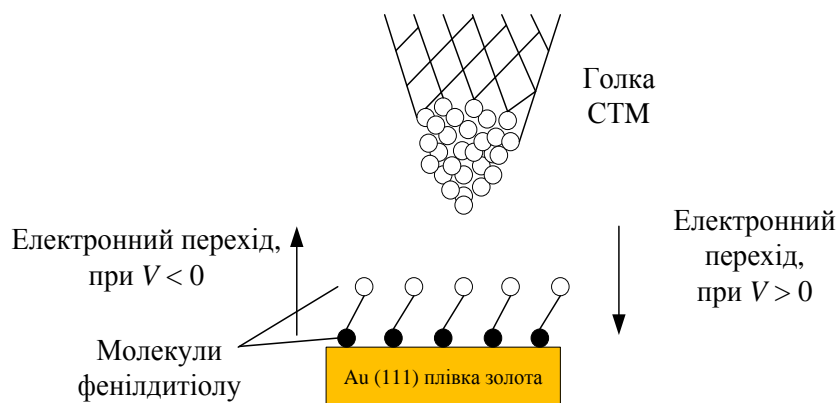


Рис..6.14.Схема одноелектронного транзистора, побудованого на молекулі фенілдитіолу

Якщо прийняти контакт голки і контакт плівки золота з молекулою як електроди стоку і витоку, то структуру можна представити у вигляді, зображеному на рис.6.15, а. Відповідно до формалізму Ландауера [6.4] у моделі одноелектронного транспорту на основі молекули фенілдитіолу протікання струму визначається функцією Фермі-Дірака, яка, у свою чергу, залежить від розташування енергетичних рівнів молекули (рис.6.15,б), електрохімічних потенціалів контактів і температури.

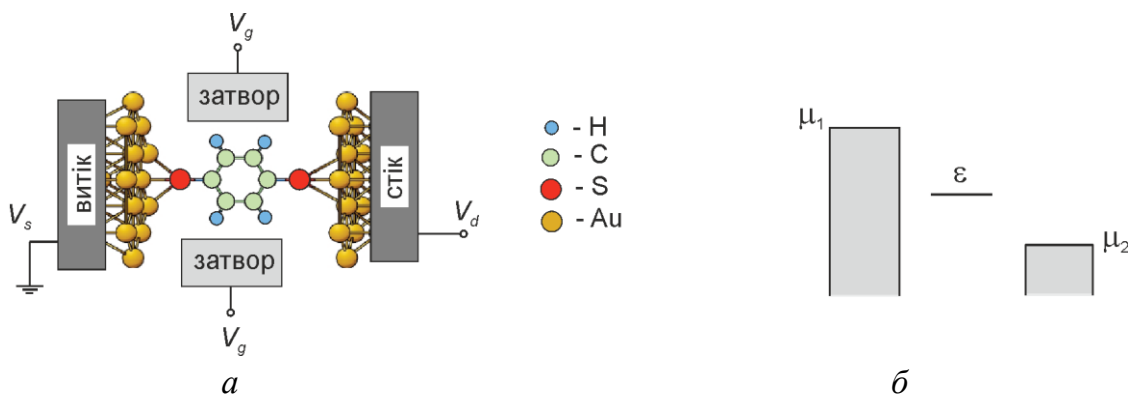


Рис. 6.15. Структура молекулярного транзистора, побудованого на молекулі фенілдитіолу (а) та розташування рівня енергії молекули при протіканні струму (б)

Отже для моделювання молекулярного одноелектронного транзистора потрібно знати параметри енергетичних рівнів молекули фенілдитіолу та електрохімічні потенціали витоку та стоку, які є контактами із золота Au, а також визначити параметри середовища. Поверхня золота має роботу виходу

електронів приблизно 5,3 eV, а потенціал електронної спорідненості (рівень енергії LUMO-орбіталі) і потенціал іонізації (рівень енергії НОМО-орбіталі) для ізольованого фенілдитіолу у газовій фазі, як повідомляється у роботі [6.4, 6.20], становить близько 2,4 eV і 8,3 eV відповідно. Отже, рівень енергії Фермі молекули повинен знаходитись між цими двома значеннями.

Ряд авторів виконували детальні розрахунки, щоб знайти енергію Фермі по відношенню до молекулярних рівнів для молекули фенілдитіолу, затиснутої між золотими контактами, але в цих результатах існують значні розбіжності. Різні теоретичні групи розміщували рівень енергії Фермі поруч з LUMO або НОМО рівнями. Густина станів всередині зазору НОМО-LUMO досить мала, що робить місце розташування енергії Фермі дуже чутливим до невеликої кількості переносу електронів. Це може істотно вплинути на теорію і експеримент. Для даної моделі можна вибрати середнє значення енергії Фермі, для зручності розрахунків, відповідно до роботи [6.4] вибрано 5 eV.

Вибір параметрів електрохімічних потенціалів обґрунтовується наступним чином. Оскільки середній потенціал у молекулі $-V/2$, то при виборі $\mu_1 = E_f - eV$ і $\mu_2 = E_f$ енергетичний рівень E змінюється відповідно. Більш зручно вибрати параметри так, щоб середній молекулярний потенціал дорівнював нулю, і тоді не буде ніякої необхідності перенесення рівня E . Наприклад вибравши $\mu_1 = E_f - eV/2$ і $\mu_2 = E_f + eV/2$.

Експериментальні дані [6.18] показують, що одноелектронні транзистори, побудовані з допомогою скануючого тунельного мікроскопа дозволяють отримувати залежність струму від напруги за кімнатної температури. Отже параметр температури можна вибирати для даної моделі $T = 300$ K.

Таким чином враховуючи режими функціонування транзистора, задаючись параметрами моделі, параметрами середовища, та використовуючи формули для розрахунку струму можна обчислити вихідні характеристики струму для даної простої моделі.

Спрощена модель. Для побудови моделі одноелектронного транзистора, потрібно проаналізувати властивості і умови функціонування одноелектронних транзисторів. Найпростіша модель молекулярного одноелектронного транзистора може бути представлена, як однорівнева система «метал-молекула-метал», без участі затвору. Металічні електроди – витік і стік, молекула – квантова точка.

Для моделювання була вибрана квантова точка молекули фенілдитіолу, витік і стік вибрані як металеві контакти із золота.

Для розрахунку струму даної моделі були використані параметри модельної структури:

- енергія молекули: $E = -5,5$ eV;
- енергія рівня Фермі : $E_f = -5$ eV;
- «розширення» енергії контактів: $\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,2$ eV;
- енергія зарядки одним електроном: $U = 1$ eV;
- тепловий потенціал : $k_B T = 0,026$ eV.

Для протікання струму у структурі повинна виконуватись умова $f(E, \mu_1) \neq f(E, \mu_2)$. Тому необхідно, щоб енергія молекули знаходилася між електрохімічними потенціалами двох контактів μ_1 і μ_2 (рис. 6.12). Для даної моделі напруга між витоком і стоком змінювалась в інтервалі значень від -4 eV до 4 eV. При цьому була отримана типова залежність I від V (рис.6.16).

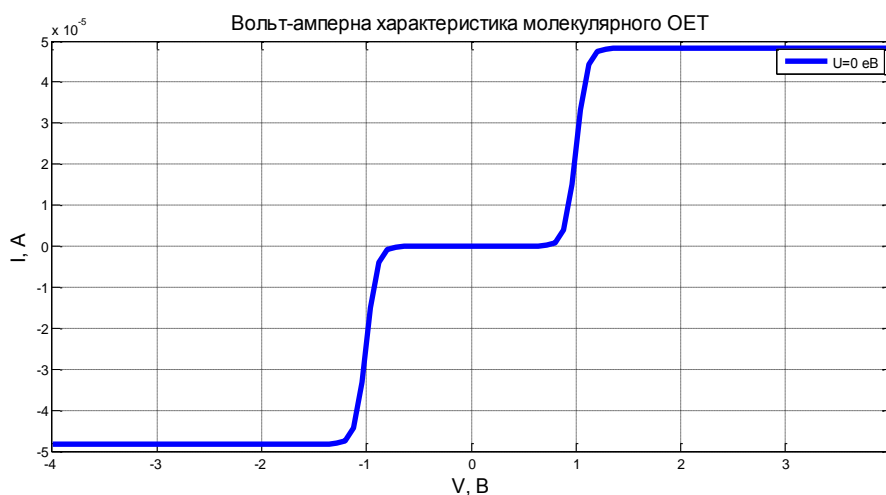


Рис. 6.16. Вольт-амперна характеристика простої однорівневої моделі одноелектронного транзистора на основі молекули фенілдитіолу

Проаналізуємо дану залежність. Спочатку струм дорівнює нулю, оскільки обидва μ_1 і μ_2 вище енергетичного рівня молекули (рис. 6.17).

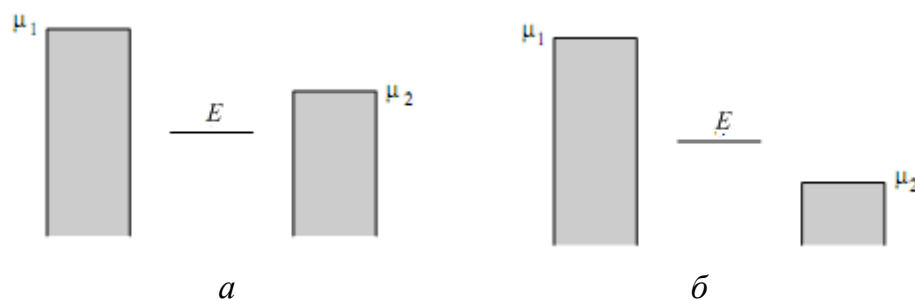


Рис. 6.17. Розташування рівня енергії молекули за відсутності струму (а) та при протіканні струму (б)

Зі збільшенням напруги рівень μ_2 знижується і стає нижчим за енергетичний рівень молекули, як показано на рис.6.17, б. Внаслідок цього, струм починає зростати і збільшується до максимального значення струму I_{\max} , який може протікати через один рівень, встановивши $f(E, \mu_1) = 1$ і $f(E, \mu_2) = 0$, що виходить з рівняння 6.12:

$$I_{\max} = \frac{2e}{\hbar} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2}. \quad (6.13)$$

Для рис.6.17 було обрано $\mu_2 = E_f - eV / 2$ і $\mu_1 = E_f + eV / 2$. Можна, звичайно, так само обрати $\mu_2 = E_f - eV$ і $\mu_1 = E_f$.

Моделювання кулонівської блокади. Кулонівська блокада проявляється за певних умов функціонування транзистора. Ці умови у молекулярному одноелектронному транзисторі визначаються із формалізму Ландауера, згідно з яким при виконанні умови $U \gg \Gamma$ у транзисторі проявлятиметься явище кулонівської блокади. В іншому випадку, коли $U \sim \Gamma_{1,2}$, транзистор працює у режимі самоузгодженого поля.

Отже необхідно врахувати два режими функціонування транзистора:

- 1) режим кулонівської блокади;
- 2) режим самоузгодженого поля.

Явище кулонівської блокади пов'язане з процесами зарядження квантової точки. Для того щоб врахувати процеси зарядження вводиться потенціал самоузгодженого поля $U_{\text{СМП}}$, який залежить від зміни кількості електронів відносно середнього числа електронів у рівноважному стані ($f_0 = f(E_0, E_f)$) і розраховується наступним чином:

$$U_{\text{СМП}} = U(N - 2f_0), \quad (6.14)$$

де U – потенціальна енергія в точці, де знаходиться молекула; N – кількість електронів, що заселяють енергетичний рівень молекули; $2f_0$ – рівноважна кількість електронів, які заселяють рівень.

Нехай потенціал самоузгодженого поля впливає на молекулярний рівень енергії наступним чином :

$$E = E_0 + U_{\text{СМП}}. \quad (6.15)$$

Оскільки потенціал самоузгодженого поля залежить від числа електронів, необхідно обчислювати потенціал за допомогою самоузгодженої процедури, показаної на рис. 6.18.

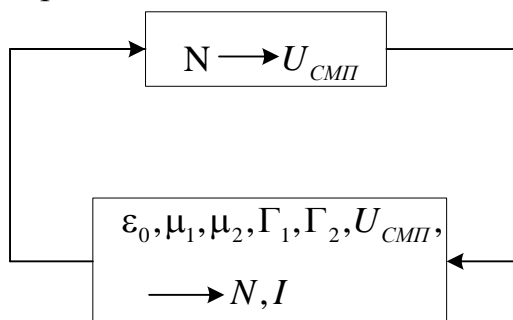


Рис. 6.18. Ілюстрація процедури самоузгодженої ітерації

Таким чином, якщо енергію точки, де знаходиться молекула прийняти рівною, наприклад 1 еВ, можна розрахувати вплив процесів зарядження на вихідні характеристики транзистора.

У результаті було отримано характеристики молекулярного одноелектронного транзистора з урахуванням процесів зарядження молекули, зображені на рис.6.19, рис.6.20.

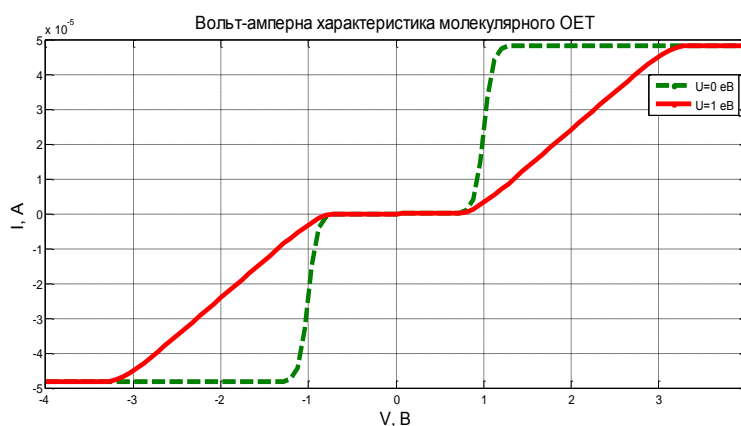


Рис. 6.19. Вольт-амперна характеристика молекулярного одноелектронного транзистора з врахуванням процесів зарядження ($U = 1$ еВ) і без їх врахування ($U = 0$ еВ)

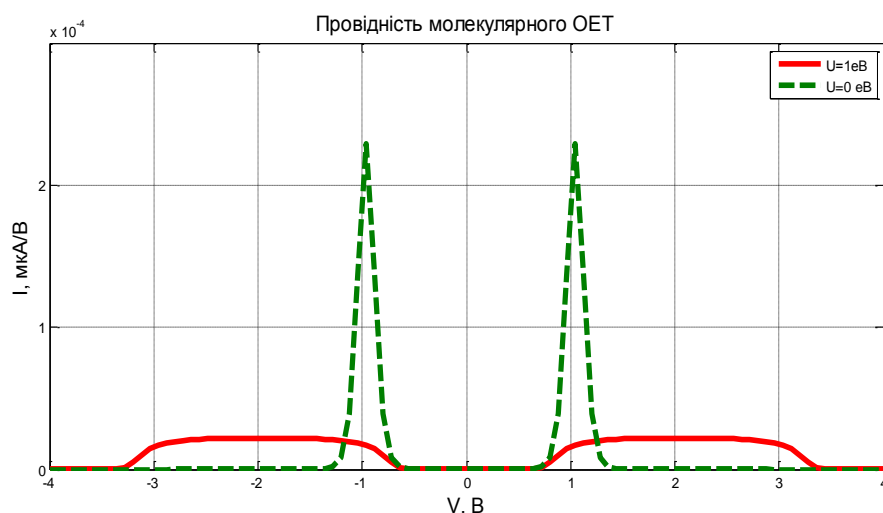


Рис. 6.20. Провідність молекулярного одноелектронного транзистора з врахуванням процесів зарядження ($U = 1$ eV) та без їх врахування ($U = 0$ eV)

Результати моделювання показують, що при врахуванні процесів зарядження гострі піки провідності розширюються. Цю характеристику можна пояснити наступним чином. Спочатку струм дорівнює нулю, так як обидва рівні Фермі μ_1 і μ_2 вищі за енергетичний рівень молекули (рис. 6.17). При прикладанні напруги розташування електрохімічних потенціалів сприятиме переходу електронів із витоку на молекулу, при цьому будуть змінюватись енергетичні рівні самої молекули. Електрон, який потрапив у квантову точку (у даному випадку на молекулу), «відштовхуватиметься» від електронів у контактах. Для того, щоб наступний електрон перейшов з витоку на молекулу потрібно, щоб енергія електрона у витоку була більшою ніж енергія електрона на молекулі. Як тільки цієї енергії у витоку буде достатньо для подолання сил відштовхування, електрон перейде на молекулу. Слід зауважити, що зі збільшенням електрохімічного потенціалу на витоці електрохімічний потенціал на стоці буде зменшуватись, що й сприятиме переходу електрона з молекули на стік. На вольт-амперній характеристиці ці рівномірні процеси зарядження молекули відповідають поступовому збільшенню струму до встановлення максимального значення струму I_{\max} , який може протікати через один рівень. На характеристиці, що зображена на рис. 6.20., процеси зарядження відповідають розширеним пікам провідності.

Врахування розширення рівнів. Функціонування транзистора у режимах самоузгодженого поля і кулонівської блокади залежить від «розширення» рівнів Γ_1, Γ_2 . Тому розглядаючи моделювання кулонівської блокади у моделі транзистора слід проаналізувати вплив цього ефекту. Для цього були взяті параметри з попередньої моделі і змінюючи розширення

рівнів Γ_1, Γ_2 , отримано вихідні характеристики транзистора, зображені на рис.6.21.

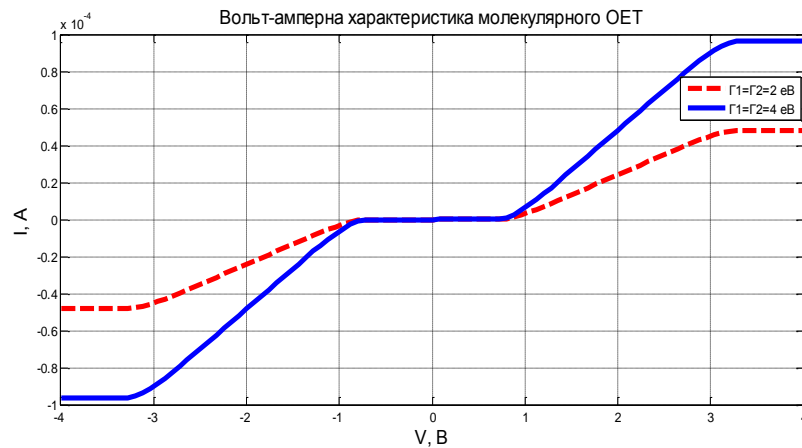


Рис. 6.21. Вольт-амперні характеристики молекулярного одноелектронного транзистора з наступними параметрами: $E_f = -5,5$ еВ, $E = -5,5$ еВ, $U = 1$ еВ

Вольт-амперні характеристики молекулярного одноелектронного транзистора показують, що зі збільшенням енергій рівнів розширення ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,4$ еВ) функціонування одноелектронного транзистора нагадує режим самоузгодженого поля, а за менших значень ($\Gamma_1 = \Gamma_2 = 0,2$ еВ) - режим кулонівської блокади.

Для даної моделі проявляється асиметрія вольт-амперних характеристик, як показано на рис.6.26. Асиметрія пов'язана з різними значеннями Γ_1 і Γ_2 . Оскільки з наближенням $\Gamma_2 = 0,4$ еВ до зарядової енергії $U = 1$ еВ явище кулонівської блокади проявлятиметься меншою мірою, то відповідно структура перебуватиме у режимі, наближеному до режиму самоузгодженого поля. Ці характеристики можуть пояснити деякі експериментальні результати [6.21], де показано асиметрію вольт-амперної характеристики (рис. 6.22).

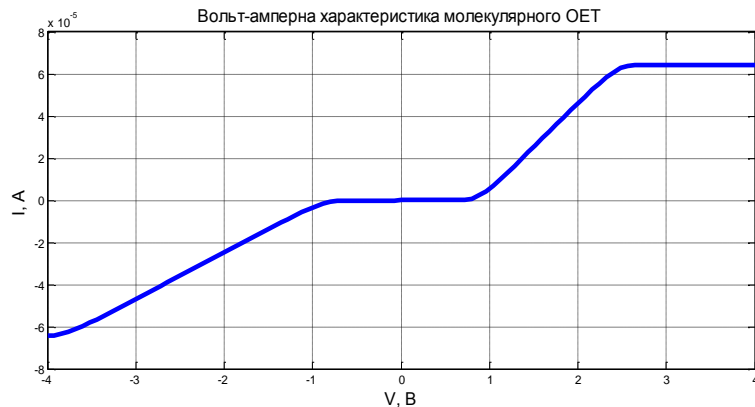


Рис. 6.22. Вольт-амперна характеристика молекулярного ОЕТ з параметрами:

$$E_f = -5 \text{ еВ}, E_0 = -5,5 \text{ еВ}, U = 1 \text{ еВ}, \Gamma_1 = 0,2 \text{ еВ}, \Gamma_2 = 0,4 \text{ еВ}$$

Врахування впливу температури. На одноелектронні процеси має вплив температура середовища, у якому проходять дані процеси. Вольт-амперні характеристики з врахуванням впливу температури зображено на рис.6.23.

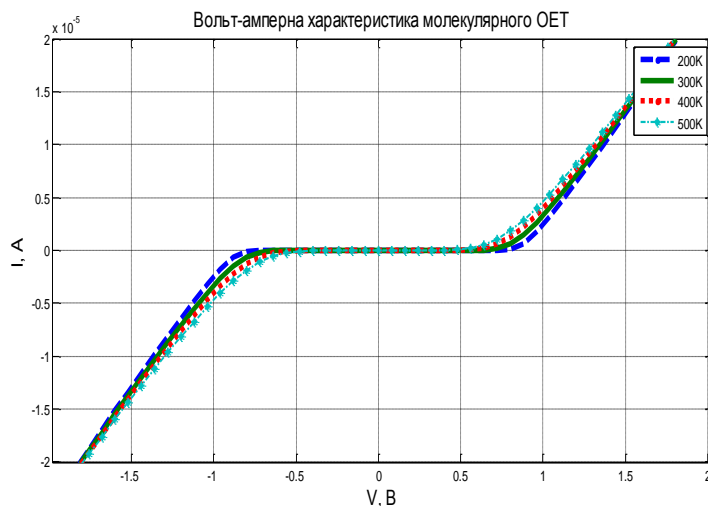


Рис. 6.23. Вольт-амперні характеристики молекулярного одноелектронного транзистора з різними значеннями температур для параметрів : $E_f = -5$ еВ,

$$E_0 = -5,5 \text{ еВ}, U = 1 \text{ еВ}$$

З аналізу вихідних характеристик видно, що температура впливає на вихідні характеристики транзистора, однак цей вплив незначний. Підвищення температури до 500 К майже не впливає на процеси зарядження, тобто на кулонівську блокаду. Ці результати є важливими для побудови транзисторів даного типу, адже, якщо температура несуттєво впливатиме на процеси зарядження молекули, то виготовлення і функціонування таких транзисторів буде можливим за кімнатних температур.

Врахування впливу затвору. На енергетичні рівні молекули можна впливати не тільки зміною напруги між витокom та стоком, а також третім електродом, який може контролювати перехід електронів, змінюючи енергетичні рівні молекули. Вплив затвору можна врахувати через потенціал Лапласа (U_L) , точніше через потенціал самоузгодженого поля ($U_{\text{СМП}}$). Самоузгоджений потенціал у відповідності до [6.16] можна знайти за формулою:

$$U_n = U_0 + \alpha [U_c - U_0]. \quad (6.16)$$

Тут U_n – нове наближення; U_0 – попереднє наближення; α – коефіцієнт, що значно менший одиниці; U_c – розраховується за наступною формулою:

$$U_c = U_L + U_e \Delta N. \quad (6.17)$$

У даній формулі U_e – енергія зарядження одним електроном, $\Delta N = N - N_{1,2}$.

Для врахування впливу затвору на систему «метал-молекула-метал» розглянемо «ємнісну» модель одноелектронного транзистора, що зображена на рис.6.24.

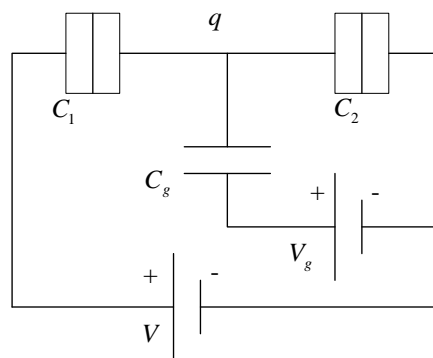


Рис. 6.24. Ємнісна модель одноелектронного транзистора (ОЕТ)

Дана модель є електричним колом, у якому поряд з джерелами напруги V , V_g , конденсатором C_g враховано тунельні переходи у вигляді ємностей C_1 , C_2 .

Дана модель подібна схемі, зображеній на рис.6.25. У даній схемі відомими величинами є напруги (V_{12} , V_{32}) і ємності (C_1 , C_2 , C_g), невідомими – напруги (V_{10} , V_{20} , V_{30}), отже необхідно розв'язувати три рівняння.

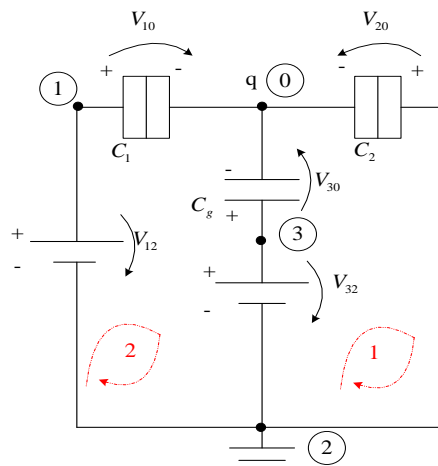


Рис. 6.25. Структурний граф моделі одноелектронного транзистора

Перед підключенням напруги точка "q", була електронейтральна (заряд точки дорівнює нулю). Прикладаючи напругу, заряд розподіляється між ємностями схеми, але при цьому неможливо ні взяти ні додати заряд із точки "q", тому рівняння можна записати наступним чином:

$$0 = q_1 + q_2 + q_g \quad (6.18)$$

Відповідно, оскільки заряд пов'язаний з ємністю і напругою ($q = CV$), то рівняння набуде вигляду:

$$C_1 V_{10} + C_2 V_{20} + C_g V_{30} = 0. \quad (6.19)$$

Для структурного графа, що зображений на рис. 6.25, розглянемо 2 контури. Для першого контуру запишемо рівняння відповідно до другого закону Кирхгофа:

$$V_{20} - V_{30} + V_{32} = 0. \quad (6.20)$$

Для другого контуру подібне рівняння запишеться:

$$V_{10} - V_{30} + V_{32} - V_{12} = 0. \quad (6.21)$$

З рівняння (6.20) виразимо V_{20} :

$$V_{20} = V_{30} - V_{32}. \quad (6.22)$$

Відповідно з рівняння (6.21) виразимо V_{10} :

$$V_{10} = V_{30} - V_{32} + V_{12}. \quad (6.23)$$

Далі рівняння (6.22), (6.23) підставимо у рівняння (6.19) і знайдемо напругу V_{30} :

$$C_1 (V_{30} - V_{32} + V_{12}) + C_2 (V_{30} - V_{32}) + C_g V_{30} = 0, \quad (6.24)$$

$$C_1 V_{30} - C_1 V_{32} + C_1 V_{12} + C_2 V_{30} - C_2 V_{32} + C_g V_{30} = 0, \quad (6.25)$$

$$V_{30} (C_1 + C_2 + C_g) - V_{32} (C_1 + C_2) + V_{12} C_1 = 0, \quad (6.26)$$

$$V_{30} = \frac{C_1 + C_2}{C_1 + C_2 + C_g} V_{32} - \frac{C_1}{C_1 + C_2 + C_g} V_{12}. \quad (6.27)$$

Потенціал (V) точки "0" буде дорівнювати :

$$V = V_{30} - V_{32}, \quad (6.28)$$

$$V = \frac{C_1 + C_2}{C_1 + C_2 + C_g} V_{32} - \frac{C_1}{C_1 + C_2 + C_g} V_{12} - V_{32}, \quad (6.29)$$

$$V = -V_{32} \frac{C_g}{C_1 + C_2 + C_g} - V_{12} \frac{C_1}{C_1 + C_2 + C_g}. \quad (6.30)$$

Якщо позначити суму трьох ємностей (C_1 , C_2 , C_g) через C_Σ і помножити обидві сторони рівняння на заряд електрона (q), то можна отримати потенціал Лапласа U_L у наступному вигляді:

$$U_L = qV = -qV_{32} \frac{C_g}{C_\Sigma} - qV_{12} \frac{C_1}{C_\Sigma}. \quad (6.31)$$

Відповідно до [6.16], енергія зарядження одним електроном для моделі з трьома ємностями визначається формулою:

$$U_e = \frac{q^2}{C_\Sigma}. \quad (6.32)$$

Звідси потенціал самоузгодженого поля , що враховує вплив затвору, має наступний вигляд:

$$U_c = U_L + U_e \Delta N = -qV_{32} \frac{C_g}{C_\Sigma} - qV_{12} \frac{C_1}{C_\Sigma} + \frac{q^2}{C_\Sigma} \Delta N. \quad (6.33)$$

Оскільки нас цікавить вплив напруги затвору, то вплив ємностей можна записати через коефіцієнти α_g, α_D . У результаті отримуємо:

$$U_L = -\alpha_g qV_g - \alpha_1 qV_1. \quad (6.34)$$

За допомогою наведених вище формул, а також виведеної залежності (6.34) була розрахована залежність струму від напруги (рис.6.26). Параметри моделі, а саме відношення ємностей обиралися наступними: $\alpha_g = 1$, $\alpha_D = 0,5$; всі інші параметри взято з роботи [6.16].

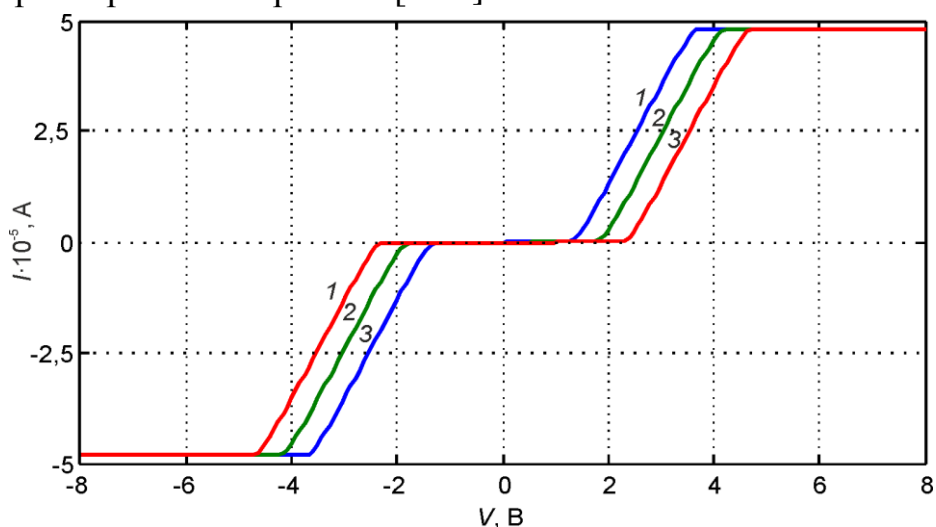


Рис. 6.26. Вольт-амперна характеристика молекулярного одноелектронного транзистора зі значеннями параметрів: $\alpha = 0,05$, $\alpha_g = 1$, $\alpha_D = 0,5$, $U_e = 1$ eV.

Позначення: 1 – $V_g = 0$ В, 2 – $V_g = 0,5$ В, 3 – $V_g = 1$ В

ВАХ показує, що із збільшенням позитивної затворної напруги зменшується струм. Механізм зниження струму наступний. Підключення додатної напруги на затвор знижуватиме енергетичний рівень E молекули у структурі і тим самим буде наближати його до рівня Фермі стоку. За таких умов струм буде знижуватись і для $E \leq \mu_1, \mu_2$ протікати взагалі не буде відповідно до [6.4].

Для верифікації описаної математичної моделі використаємо експериментальні дані роботи [6.18], наведені на рис. 6.26. На ній спостерігаються піки струму для напруг від -2 В і 2 В. На характеристиці, розрахованій за допомогою моделі, піки максимальних значень провідності спостерігаються за напруг -1.5 В і 1.5 В. Пікові значення провідності відносно сильно залежать від енергетичного рівня Фермі молекули, який до цього часу не має точно визначеного значення для молекули фенілдитіолу [6.4]. Цим і можна пояснити різницю між піковими значеннями провідності двох характеристик, що зображені на рис.6.27, 6.28.

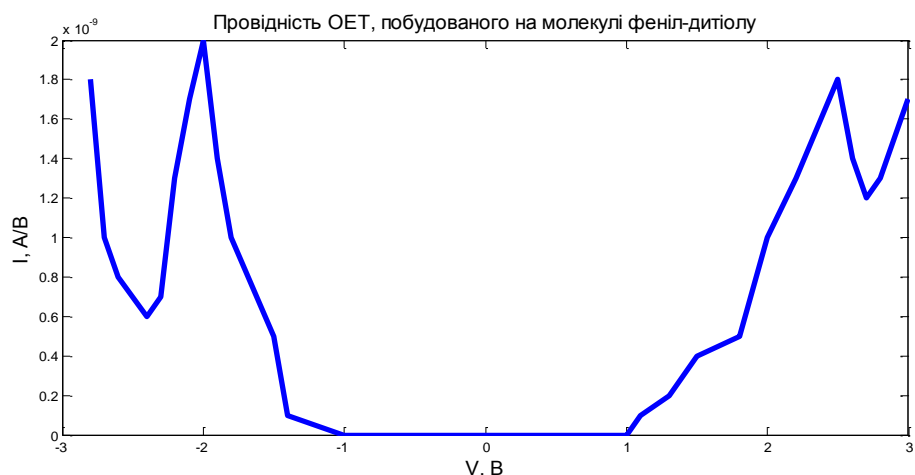


Рис. 6.27. Характеристика залежності провідності одноелектронного транзистора, побудованого на молекулі фенілдитіолу, від напруги, знайдена експериментально

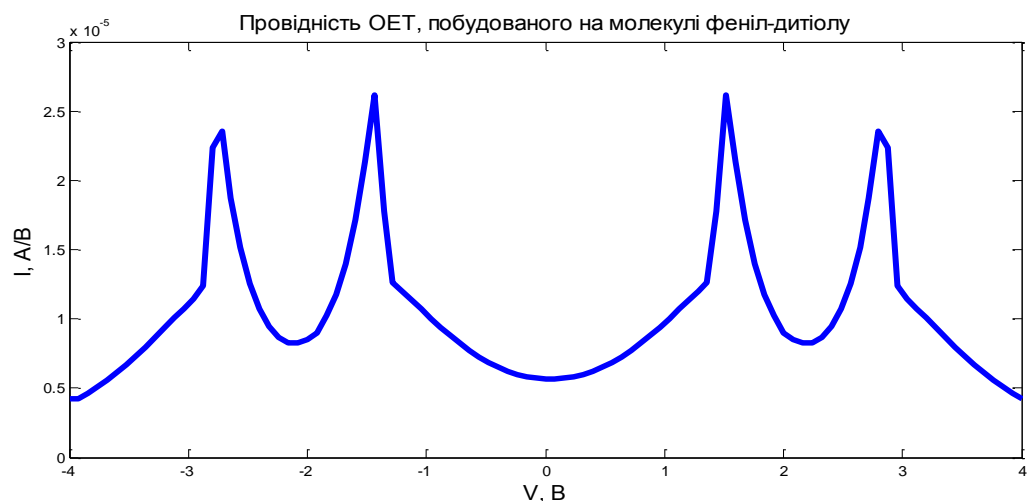


Рис. 6.28. Характеристика залежності провідності від напруги для одноелектронного транзистора на молекулі фенілдитіолу, розрахована методом функції Гріна

Провідність, знайдена експериментально, має значення на три порядки нижчі ніж значення провідності, що розрахована чисельно. Відмінність між результатами можна пояснити тим, що модель не враховує блокувальні бар'єри типу Шоттки, які можуть суттєво знижувати густину струму через такий транзистор. Ймовірно між скануючим тунельним мікроскопом та молекулою існують деякі паразитні процеси, пов'язані з взаємодією голки СТМ та молекули. Однак на якісному рівні експериментальні і теоретичні результати певним чином узгоджуються, що підтверджує можливість моделювання ОЕТ методом функцій Гріна з подальшим його розвитком.

Контрольні запитання та вправи

- 6.1. Дайте характеристику одноелектронним структурам.
- 6.2. Поясніть фізичні механізми одноелектронного тунелювання.
- 6.3. Поясніть механізми кулонівської блокади.
- 6.4. Опишіть характерні структури одноелектронного транзистора.
- 6.5. Охарактеризуйте основні поняття «ортодоксальної теорії» тунелювання.
- 6.6. У чому полягає моделювання на основі «напівкласичної моделі» і застосування функцій Гріна?
- 6.7. Опишіть структуру молекулярного транзистора, побудованого на молекулі фенілдитіолу.
- 6.8. У чому суть процесів і енергетичних станів на границі «метал»-«молекула»?
- 6.9. Яким рівняннями описуються енергетичні стани на контакті «метал»-«молекула»?
- 6.10. Поясніть енергетичні діаграми структури «метал-молекула-метал» при подачі на контакт додатної та від'ємної напруги.
- 6.11. У чому суть ємнісної моделі одноелектронного транзистора?
- 6.12. Проаналізуйте результати моделювання одноелектронного транзистора.

7. ПАСИВНІ КОМПОНЕНТИ НАНОІНТЕГРАЛЬНИХ СХЕМ: МІЖЗ'ЄДНАННЯ, ЛІНІЇ ПЕРЕДАЧІ, КОНДЕНСАТОРИ

7.1 Дипольні антени на основі нанотрубок

Однією з найважливіших і невирішених проблем нанотехнологій залишається забезпечення електричного контакту наноелектронних пристроїв з елементами макроскопічного рівня без істотних втрат у потенціальній густині струму, яка досягається на нанорівні. Поки контакт з усіма нанопристроями, які включають нанотрубки і нанонитки, реалізують за допомогою створення контактних областей. Але цей шлях не може бути ефективним у випадку об'єднання великої кількості наносистем. Дійсно, топологічні розміри наносистем істотно менші, ніж дозволяє отримати сучасне літографічне устаткування. І відносно низька щільність розміщення контактних областей перекреслює переваги можливої щільності упаковки наноелектронних елементів.

Одне з можливих вирішень проблеми полягає в організації безпроводного зв'язку з нанопристроями [7.1].

Якщо кожен сполучний дріт пов'язаний з нанотрубкою різної довжини (отже, різної резонансної частоти), то проблема мультиплексування сигналів входу/виходу може бути перенесена з просторової області у спектральну. Отже, послаблюючи вимоги до високого розрізнення літографічного процесу для ліній передачі, можна істотно понизити вартість наноелектронних виробів. Ідея безпроводних з'єднань досить універсальна і легко масштабована (рис.7.1).

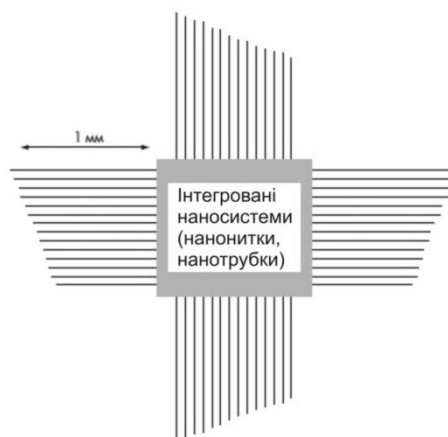


Рис. 7.1. Наносистема з ґратками наноантен для безпроводного зв'язку з взаємодіючими макропристроями

За таким же принципом можлива організація електроживлення нанопристроїв, причому наноантени використовуватимуться як ректени (випрямляючі антени), у яких роль випрямлячів виконують все ті ж нанотрубки. Подібні модифікації наноструктур дозволяють перейти від пасивних наноантен до активних рішень, що мають на додаток до просторово-вибіркових і частотно-селективних властивостей можливість прямого підсилення прийнятих сигналів.

Аналіз хвильових процесів у нанотрубках можна проводити, використовуючи теорію довгих ліній [7.2] і представлення цих ліній у вигляді схемної моделі із зосередженими параметрами. Особливість електричних властивостей вуглецевих нанотрубок може бути врахована включенням до їх схемної моделі, окрім розподілених по довжині провідника традиційних електростатичної ємності і магнітної індуктивності, двох додаткових розподілених елементів: кінетичної індуктивності і квантової ємності.

Кінетична індуктивність характеризує ефект "запасання" струму в нанопровіднику не у наслідок існування магнітного поля, а унаслідок інерції руху носіїв заряду. Електрони реагують на прикладене електричне поле не миттєво, а з деякою затримкою. Тому при дії електричних полів, що періодично змінюються, відповідні варіації швидкості електронів відстають по фазі від змін напруженості електричного поля. Зовні це аналогічно наявності індуктивності. Кінетична енергія, обумовлена переміщенням електронів при проходженні струму, може бути описана виразом [7.1]:

$$K = \int_V n \frac{mv^2}{2} dV ,$$

де n – концентрація електронів у провіднику; m і v – маса і швидкість їх руху.

В результаті інтегрування за об'ємом провідника нескладно отримати:

$$K = n \frac{mv^2}{2} V = n \frac{mv^2}{2} Sl ,$$

де S – площа поперечного перетину провідника; l – його довжина.

Енергія, пов'язана з інерційністю руху електронів, подібна до тієї, яка запасється у магнітному полі провідника із струмом. Це дозволяє зіставити магнітну енергію індуктивності з інерцією зарядів:

$$\frac{1}{2} L_k i^2 = \int_V n \frac{mv^2}{2} dV = n \frac{mv^2}{2} Sl .$$

Якщо врахувати вираз для струму $i = envS$, то отримаємо вираз для кінетичної індуктивності у вигляді:

$$L_k = \frac{ml}{ne^2 S}.$$

У разі макроскопічних провідників кінетична індуктивність завжди набагато менша, ніж звичайна «магнітна» індуктивність. У тонких провідниках з малим поперечним перетином кінетична індуктивність переважає.

Ця обставина, а також те, що розміри поперечного перетину провідника у порівнянні з квантово-механічною довжиною хвилі електрона, по суті перетворює провідник у одномодовий хвилевід для електронних хвиль.

Кінетична індуктивність для одновимірних хвилеводних систем, що каналізують електронні хвилі, у перерахунку на одиницю довжини провідника описується спрощеною квантованою залежністю [7.3]:

$$L_k = \frac{h}{2e^2 v_F},$$

де h – постійна Планка; v_F – швидкість Фермі для носіїв заряду.

Для вуглецевих нанотрубок у роботі [5.9] вказана величина $v_F = 8 \cdot 10^5$ м/с, відповідно, питома лінійна (погонна) кінетична індуктивність складає $L_k = 16$ нГ/мкм.

Поняття квантової ємності було введено у 1987 році Сержем Лур'є (Luryi) [5.10] для визначення ємності шару двовимірного електронного газу:

$$C_Q = e^2 \cdot D,$$

де D – двовимірна густина станів системи.

У свою чергу, для двовимірного електронного газу $D = 4m^* \pi / h^2$ (m^* – ефективна маса носіїв). Для внесення до квантової фермі-системи нової частинки (відповідно до принципу Паулі), її енергія повинна перевищувати рівень Фермі. У одновимірних системах це може бути прирівняно до питомої енергії на одиницю довжини. З цієї енергії може бути розрахована погонна ємність на одиницю довжини, що отримала найменування квантової ємності. Стосовно одновимірного випадку нанотрубок у роботі [5.9] квантова ємність на одиницю довжини визначається як:

$$C_q = 2e^2 / h v_F.$$

При швидкості Фермі $v_F = 8 \cdot 10^5$ м/с для графена і вуглецевих нанотрубок питома квантова ємність має порядок 100 аФ/мкм. Формування дипольної антени з вуглецевих нанотрубок ілюструє рис.7.2.

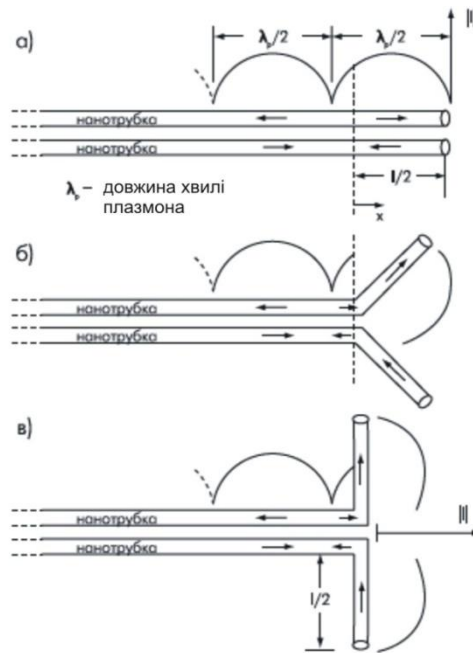


Рис. 7.2 . Формування дипольної антени з двопровідної лінії на нанотрубках

У двопровідній лінії на нанотрубках магнітною індуктивністю можна нехтувати унаслідок її малої величини. Схемна модель такої лінії наведена на рис. 7.3, а [7.3]. Електростатичну ємність двопровідної лінії можна розрахувати за формулою [7.3]:

$$C_{ES} = \pi e / \cosh^{-1}(W / d) \approx \pi / \ln(W / d) .$$

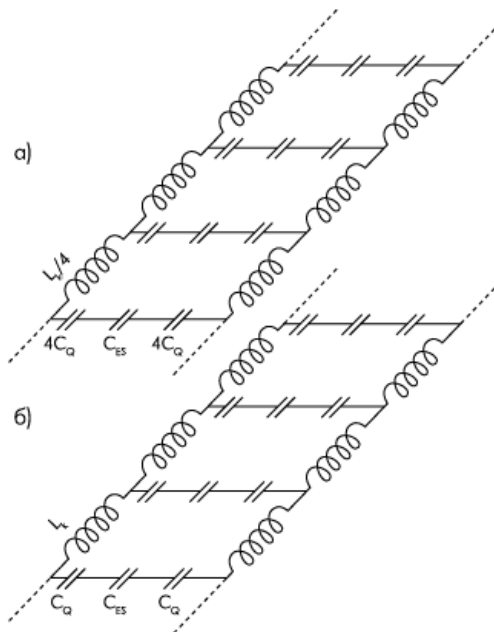


Рис. 7.3. Схемні моделі двопровідної лінії передачі на нанотрубках з врахуванням (а) та без врахування (б) спіну електронів

Слід взяти до уваги, що у вуглецевих нанотрубках, завдяки їх зонній структурі і спіновим моментам електронів, можливі чотири квантові канали поширення електронів [7.5] (чотири енергетичні стани електронів провідності): два канали для двох станів спіну. Кожен з цих каналів має власну кінетичну індуктивність і квантову ємність. Всі чотири канали характеризуються загальною електростатичною ємністю відносно металевої підкладки, що істотно впливає на радіочастотні властивості нанопровідників (рис.7.3,б) [7.5]. Оскільки квантові канали паралельні, результуюча кінетична індуктивність лінії буде у чотири рази нижчою, ніж в одноканальному випадку, а квантова ємність – у чотири рази вищою. Відповідно, приблизно до $6,45 \text{ кОм } (h/4e^2)$ зменшиться і квантовий опір змінному струму. З врахуванням цього, характеристичний імпеданс Z_c і хвильову швидкість v_p можна представити у вигляді [7.3]:

$$Z_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{R + j\omega L_k / 4}{j\omega C_{\text{заг}}}}, \quad v_p = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{(L_k / 4) C_{\text{заг}}}},$$

де R – активний опір окремо взятої нанотрубки на одиницю довжини.

Індекс « p » для хвильової швидкості означає плазмон – квазічастинку, що відповідає колективним коливанням вільного електронного газу, у даному випадку – одновимірному. Відповідно до роботи [7.3], довжина плазмонної хвилі приблизно у 100 разів менша, ніж довжина електромагнітної хвилі у вільному просторі для тієї ж частоти. Як відомо, швидкість хвилі для традиційної двопровідної лінії передачі не залежить від відстані між провідниками і дорівнює швидкості світла. При використанні ж нанотрубок інтервал між ними робить помітний вплив на швидкість поширення електромагнітної хвилі унаслідок зміни загальної ємності лінії передачі. Це істотно змінює поточний розподіл струму у порівнянні з тонким провідником.

Одним з шляхів зниження втрат у наноантенах є використання досить високої частоти електромагнітних коливань. Розрахунки умов поширення хвилі у пасивній двопровідній нанолінії передачі без дисперсії згідно [7.3] дозволяють математично сформулювати обмеження $\omega L_k / 4 \gg R$. За умови значень $R = 10 \text{ кОм/мкм}$ низькі втрати досяжні для частотного діапазону вище 400 ГГц.

У роботі [7.6] розглядається застосування вуглецевих нанотрубок з характерними розмірами (рис. 7.4) як дипольної антени, що використовує

«пачки» нанотрубок круглої і прямокутної форми, де радіус пачки R (або висота і ширина для прямокутної «пачки») мають розміри десятків нанометрів, а довжина L – порядку десятків мікрометрів. Для створення антенних пристроїв використовуються нанотрубки з металевою провідністю типу «крісло».

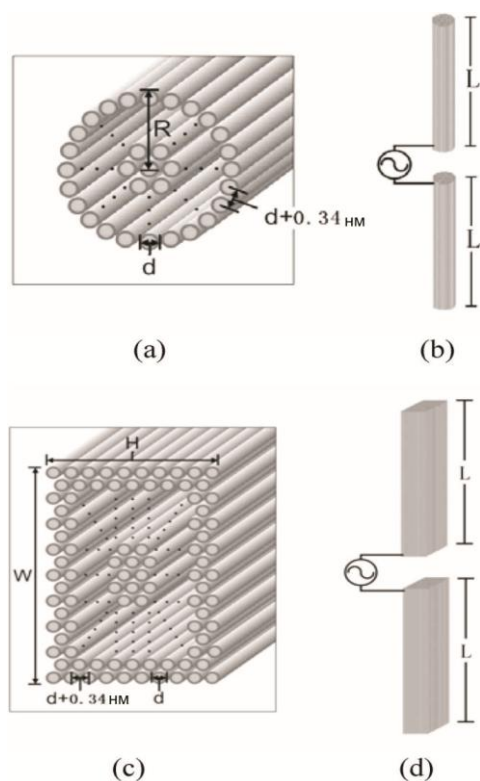


Рис. 7.4. Дипольні антени на нанотрубках

Одним з найважливіших параметрів квантових систем, як вже наголошувалося при розгляді тунельних ефектів, є квантова одиниця опору: $h/e^2 \sim 25,8$ кОм.

На відміну від звичайного резистора квантовий опір не є обернено пропорційним до площі поперечного перетину і багато менший, ніж у традиційного металевого резистора з нанорозмірами.

Крім того, у таких хвилеводах можна нехтувати скін-ефектом аж до терагерцового діапазону частот, оскільки струм електронів пов'язаний з π -зонами атома вуглецю, подібно до того, як це відбувається у графітовому листі. Таким чином, загальні втрати потужності у зазначених антенах істотно менші, ніж у традиційних. Одним з недоліків таких антен є високий характеристичний імпеданс (до 100 кОм), що

може ускладнювати узгодження із стандартними пристроями з хвильовим опором 50 Ом. У роботі [7.6] показано, що антени у вигляді «пачки» вуглецевих нанотрубок мають випромінювальну здатність на 30 – 40 дБ вищу, ніж антени на одиночних нанотрубках.

7.2. Застосування нанотрубок і нановолокон як ліній передачі та міжз'єднань у наносхемах

У роботах [7.7–7.9] наводяться приклади використання вуглецевих наноструктур як міжз'єднань і ліній передачі.

У роботі [7.7] розглядається лінія передачі у вигляді «пачки» вуглецевих нанотрубок, що з відповідними характерними розмірами схематично показано на рис.7.5. При цьому використовується поєднання металевих і напівпровідникових нанотрубок у пачці, загальна їх кількість

може досягати десятків. Змінюючи кількість і тип нанотрубок домагаються зміни їх провідності, а також ємнісних і індуктивних властивостей. Тут же запропонована одновимірна модель поширення хвиль в описаній системі нанотрубок, аналогічна рівнянням довгих ліній, у припущенні відсутності тунельних переходів електронів між окремими нанотрубками у пачці, що, як правило, виконується, оскільки провідність кожної окремої нанотрубки істотно більша провідності між трубками.

Як вже наголошувалося, у процесі виготовлення у пачці вуглецевих нанотрубок можуть бути присутні як трубки з металевою, так і напівпровідниковою провідністю.

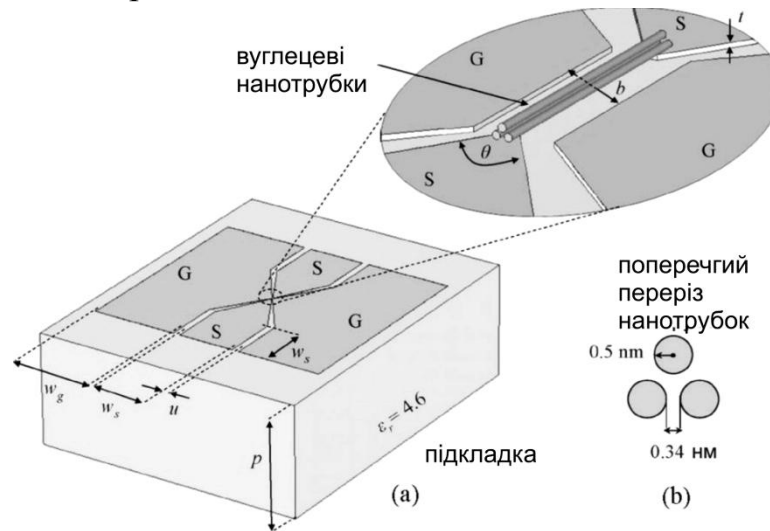


Рис. 7.5. Структура з лінією передачі у вигляді «пачки» нанотрубок

Розглянемо розподілені моделі для ліній передачі (уздовж осі z) з металевою і квазіметалевою провідністю. Для одиночної нанотрубки у припущенні виродження спіну можуть бути записані такі рівняння для заряду на одиницю довжини і для струму уздовж лінії [7.7]:

$$\frac{\partial Q_c}{\partial t} = - \frac{\partial I_c}{\partial z},$$

$$\frac{\partial I_c}{\partial t} = - \frac{4ev_F F}{h} - v_F^2 \frac{\partial Q_c}{\partial z},$$

де $v_F = 8 \cdot 10^5$ м/с – швидкість Фермі; e – заряд електрона; h – стала Планка; F – результуюча сила, що діє на електрони.

Сили, що діють на електрони можна представити у вигляді суми електромагнітних сил F_{em} і сил гальмування F_a , пов'язаних з дією різних механізмів розсіяння: $F = F_{em} - F_a$, де $F_a = mv/\tau$, де τ – час релаксації. За відомих значень струму у нанотрубці швидкість може бути знайдена як

$$v = -\frac{hI_c}{4emv_F},$$

а з урахуванням останніх співвідношень:

$$F_a = -\frac{hI_c}{4ev_F\tau}.$$

Узагальнюючи наведені вище співвідношення можна отримати вираз для струму уздовж лінії у такому вигляді:

$$\frac{\partial I_c}{\partial t} = -\frac{4ev_F F_{em}}{h} - \frac{I_c}{\partial z} - v_F^2 \frac{\partial Q'}{\partial z}.$$

У цитованій роботі [5.13] отримані також рівняння для пачки нанотрубок, аналогічні за формою відомим телеграфним рівнянням у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial z} &= -C' \frac{\partial V}{\partial t}, \\ \frac{\partial V}{\partial z} &= -\frac{R'}{2n} I - (L'_e + \frac{L'_k}{2n}) \frac{\partial I}{\partial t}. \end{aligned}$$

Тут застосовано підхід, що використовує розподіл електрохімічного потенціалу V уздовж лінії, а величини, що входять у рівняння, визначаються з наступних співвідношень.

Електрохімічний потенціал:

$$V = V_s + \frac{Q'}{2nC_q},$$

де V_s – електростатичний потенціал; n – кількість нанотрубок у пачці, а

$$C'_q = \frac{2e^2}{h\nu_F}, \quad L'_k = \frac{h}{2e^2\nu_F}, \quad R' = \frac{h}{2e^2\nu_F\tau}.$$

Тут використовуються визначені вище поняття квантової ємності і кінетичної індуктивності. Аналогічно електромагнітні параметри лінії – ємність і індуктивність лінії для пачки нанотрубок визначаються співвідношеннями:

$$C'_e = \frac{2\pi\epsilon_r\epsilon_0}{\cosh^{-1}(d/a)}, \quad L'_e = \frac{\mu_0}{2\pi} \cosh^{-1}(d/a).$$

де a – радіус нанотрубки; d – відстань пачки нанотрубок до пластини заземлення (геометричні розміри показані на рис. 7.6).

Крім того, в останніх співвідношеннях використовуються магнітна і діелектрична проникність середовища поза пачкою нанотрубок.

У роботі [7.11] наводиться приклад використання багат шарових вуглецевих нанотрубок як ліній передачі. Особливістю таких ліній є малі втрати і практично бездисперсійні характеристики передачі.

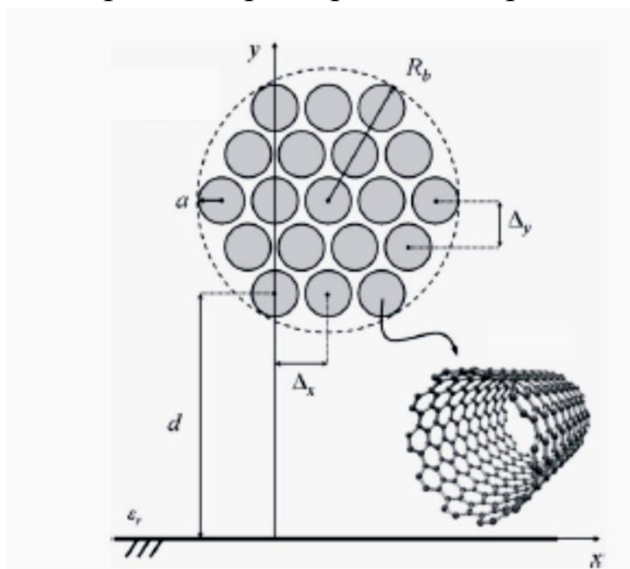


Рис. 7.6. Пачка нанотрубок з металевою провідністю

У роботі [7.11] запропоновані конструкції між'єднань у вигляді «пачки» однорідних нанотрубок, придатних, у тому числі, для комутації не лише планарних, але і багат шарових (вертикальних) наноструктур (рис. 7.7).

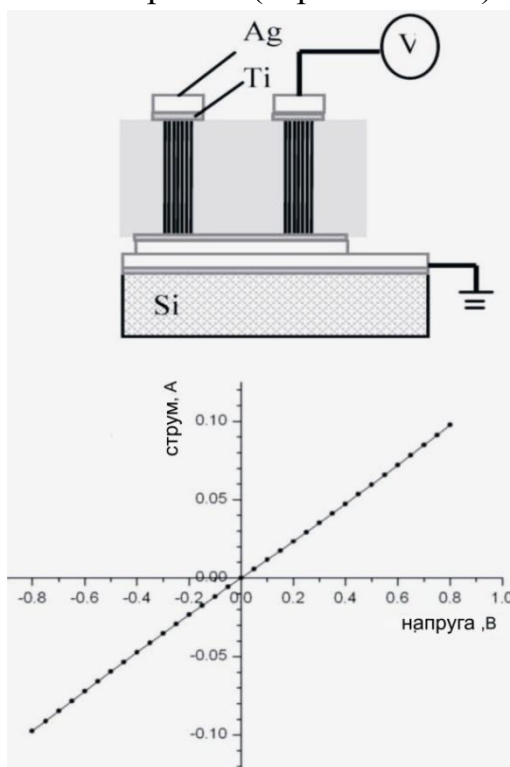


Рис. 7.7. Тестова структура у вигляді вертикальних нанотрубок та її ВАХ

Діаметр нанотрубок у такій структурі може досягати десятків нанометрів, а висота до сотень мікрометрів, що дозволяє здійснювати багатошарову компоновку наносхем. У тестовій структурі на рис. 7.7 середовище заповнення довкола системи нанотрубок між контактами є полімерним матеріалом – бензоциклобутаном. Звертає на себе увагу абсолютно лінійна вольт-амперна характеристика системи вертикальних нанотрубок. Для довжин порядку кілька сотень мікрометрів характерні значення опору наведеної системи нанотрубок складають одиниці і десятки Ом.

Приклад використання нановолокон для між'єднань, а також виготовлення контактів на кристалі наводиться у роботі [7.9]. Принциповою відмінністю є використання планарних графітових структур у вигляді нановолокон (рис. 7.8).

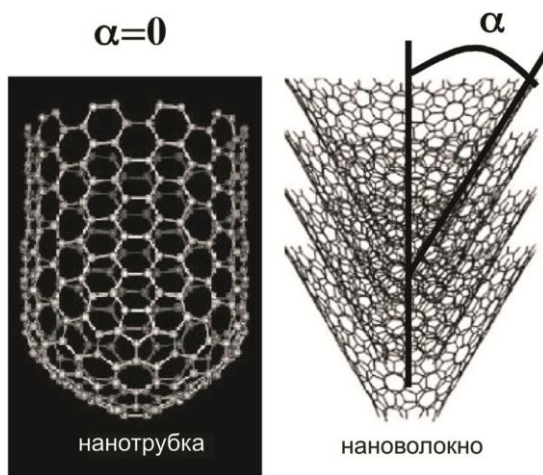


Рис. 7.8. Структурні відмінності вуглецевої нанотрубки і нановолокна

Однією з основних вимог до між'єднань є сталість провідності у широкому діапазоні температур. Наведені на рис.7.9 температурні залежності провідності для чотирьох тестових нановолоконних структур на підкладці з окислу кремнію демонструють монотонне зростання до приблизно 150К і відносну її сталість до 350 К. Тестові структури виготовлені методом плазмово-хімічного випаровування. Нановолокно може бути отримане у вигляді шару товщиною 30-40 нм на контакті у вигляді шару титану, напиленого на кремнієву підкладку.

У роботі наголошується, що як фізична модель у подібних структурах може використовуватися стрибковий механізм провідності. Двовимірною матрицею з нановолокон за температурними характеристиками демонструє переваги порівняно з між'єднаннями на нанотрубках і нанонитках.

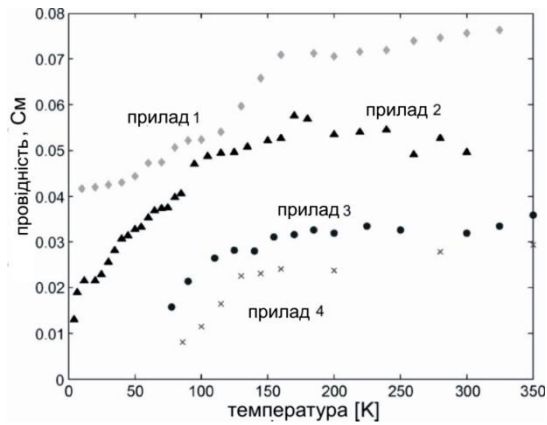


Рис. 7.9. Температурні залежності провідності зразків вуглецевого нановолокна [7.10]

У роботі [7.11] наводяться приклади використання вуглецевих нанотрубок для квантових конденсаторів для нелінійних кіл терагерцового діапазону. Квантові конденсатори є структурою (рис.7.10), що подібна до транзисторної. Компонівка структури передбачає розміщення на підкладці до 100 вуглецевих нанотрубок. За допомогою електроду, що управляє, є можливість реалізувати конденсатор із змінною ємністю (варактор) у широкому діапазоні напруги живлення різної полярності. Наводяться дані [7.11] про можливість електронного керування ємністю конденсатора.

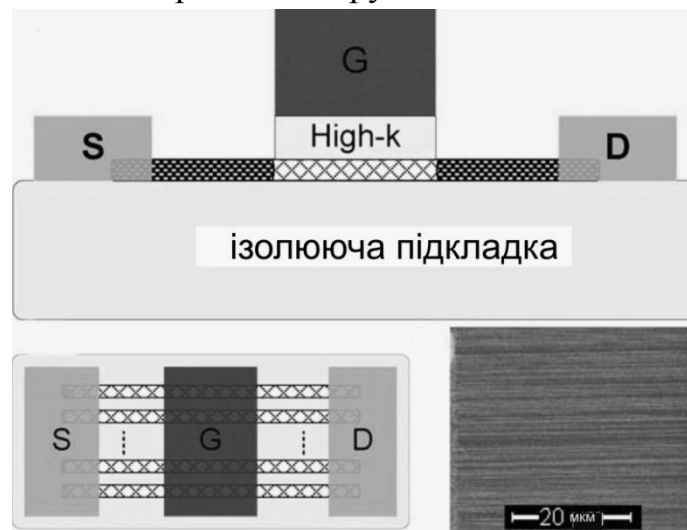


Рис. 7.10. Структура квантового конденсатора

На рис.7.11 наведено схемну модель квантового конденсатора з паразитними елементами структури. Внутрішня частина структури містить статичну ємність C_g (пов'язану з топологією структури) і квантову ємність C_q , а також кінетичну індуктивність L_k і омичний опір контакту R_g .

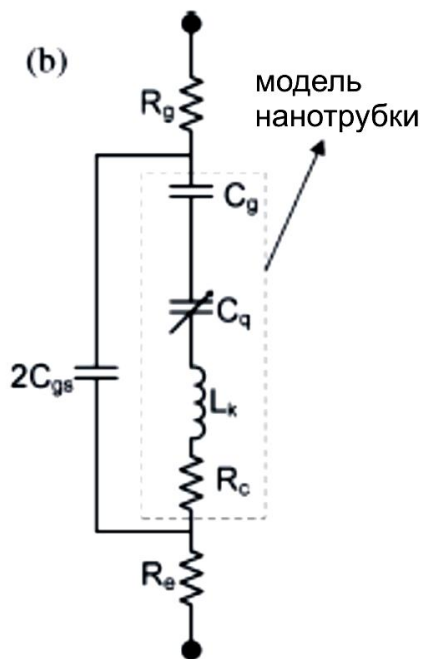


Рис. 7.11. Схемна модель квантового конденсатора

Діапазон змін ємності у аттофарадах складає майже порядок при зміні електричної напруги від -2 до 2 В. Особливостями конденсаторів є малі теплові втрати і високі швидкості перемикавання унаслідок балістичного перенесення електронів у нанотрубці, проте залишається проблема мінімізації паразитних параметрів структури. Технологічно цьому сприяє застосування так званих «*high-k*»-матеріалів – діелектриків, які мають статичну діелектричну проникність більше, ніж в оксиду кремнію ($k = 3,9$). До таких матеріалів відносяться Al_2O_3 , Ti_2O_3 , ZrO_2 , Ta_2O_5 , HfO_2 і ін.

Контрольні запитання та вправи

- 7.1. Поясніть поняття «квантового опору».
- 7.2. Поясніть поняття «кінетичної індуктивності» і «квантової ємності».
- 7.3. У чому полягає метод моделювання ліній передачі на основі вуглецевих нанотрубок?
- 7.4. Якими рівняннями описуються «довгі лінії» у наносхемах?
- 7.5. Охарактеризуйте міжз'єднання на основі пачки нанотрубок.
- 7.6. Опишіть структуру квантового конденсатора.
- 7.7. Поясніть температурні залежності провідності зразків вуглецевого нановолокна.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

- 1.1 K.Galatsis, A.Khitun, R. Ostroumov, K.L. Wang, W.R. Dichtel, E. Plummer, J.Stoddart, J.Zink, J.Lee, Y-H.Xie, K.W.Kim. Alternate State Variables for Emerging Nanoelectronic Devices// IEEE Transactions on Nanotechnology.–2009–Vol. 8, No1. P.66–75.
- 1.2 Tarakeshwar P., Palacios J.J., Kim D.M. Electrode-Molecule Interface Effects on Molecular Conductance // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2009 – Vol. 8, No 1. P. 16–21.
- 1.3 Потапов А.А. Принципы проектирования наносистем // Нано- и микросистемная техника – 2008. – № 3. – С. 5-13.
- 1.4 Грибачов В. Математические подходы к проектированию нанороботов и нанодинамических систем // Компоненты и технологии – 2010. – № 12. –140-143.
- 1.5 Зинченко Л.А., Шахнов В.А. Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем // Информационные технологии и вычислительные системы–2009. –№4. – С. 84-92.
- 2.1 Москалюк В.О. Фізика електронних процесів. Динамічні процеси. Київ.: “Політехніка”, 2004. – 180 с.
- 2.2 *Fransson J.* Non-orthogonality and electron correlations in nanotransport. Spin- and time-dependent currents. Dissertation for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics presented at Uppsala University. Uppsala, Sweden, 2002. – 101 P.
- 2.3 *Sun J.P Mains R.K., Haddad G.I.* “Resonant tunneling diodes: models and properties”, Proc. of IEEE, vol. 86, pp. 641-661, 1998.
- 2.4 *Абрамов И.И.* Проблемы и принципы физики и моделирования приборных структур микро- и нанoeлектроники. V. Резонансно-туннельные структуры // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – №3. – с. 57–70.
- 2.5 *Федяй А.В.* Моделі резонансно-тунельних діодів (аналітичний огляд). Кінетичні моделі // Н.-техн. Ж. «Електроніка і зв'язь» – 2007. - №5. – С. 11–16.
- 2.6 *Landauer R.* Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conductor. // IBM Journal of Research and Development. – 1957. – Vol. 1, 233.
- 2.7 *Meir Y., Wingreen, N.S.* Landauer formula for the current through an interacting electron region // Phys. Rev. Lett. – 1992. – Vol. 68. – P. 2512–

- 2515.
- 2.8 *Hirose K., Ono Tomoya, Fujimoto Y., Tsukamoto S.* First-principle calculation in real-space formalism // London: Imperial College Press. – 2005. – 253 p.
 - 2.9 *Pinaud O.* Transient simulation of resonant-tunneling diode // J. Appl. Phys. – 2002. – Vol. 92, No. 4. – P. 1987–1994.
 - 2.10 *Абрамов И.И., Гончаренко И.А., Коломейцева Н.В.* Комбинированная модель резонансно-туннельного диода. // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Том 39, Вып. 9. – с. 1138–1145.
 - 2.11 *Москалюк В.О., Федяй А.В., Ярошенко О.Ю.* Прикладна програма для моделювання переносу заряду в квантоворозмірних гетероструктурах з графічним інтерфейсом користувача // Н.-техн. журнал «Електроніка і зв'язь», тематический випуск «Електроніка і нанотехнології». – 2011. – №1. – С. 48-53.
 - 2.12 *Likharev K. K.* Single-electron devices and their applications // Proc. Of IEEE. – 1999. – Vol. 87. – P. 606-632.
 - 2.13 *Houten van H., Beenakker C.* Quantum point contacts // Physics Today. – 1996. – Vol. 49. – p. 22–28.
 - 2.14 *Шалимова К.В.* Физика полупроводников. Учебное пособие для вузов. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
 - 2.15 *John H. Davis.* The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction. – Cambridge University Press, 2005. – 438 p
 - 2.16 *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: учеб. пособ. для вузов в 10 томах. Том 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – 5-е изд. стереот. – М. Физматлит, 2002. – 808 с.
 - 3.1 *Федоров А. В., Рухленко И. Д., Баранов А. В., Кручинин С. Ю.* Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек. — СПб.: Наука, 2011. — 188 с.
 - 3.2 *Фізика електронних процесів. Підручник для студ. спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка» / В. О. Москалюк, В.І.Тимофєєв, Т.А.Саурова; КПП ім. Ігоря Сікорського.* – Київ : КПП ім. Ігоря Сікорського, 2020. –324 с.
 - 4.1 *Рувінський Б.М.* Термоелектричний ефект у стрічках допованого графену / Б.М. Рувінський, М.А. Рувінський // Фізика і хімія твердого тіла. – 2014. – Т. 15, № 3. – С. 457-463.
 - 4.2 *K.A.Ritter, J.W.Lyding.* The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons // Nature Materials. –Vol.8.–2009.–P.235–242
 - 4.3 *J.Bai, X.Duan, Y.Huang* Rational fabrication of graphene nanoribbons

- using a nanowire etch mask // Nano Letter. № 9. –2009. – P.2083-2087.
- 4.4 Д.А. Свинцов, В.В. Вьюрков, В.Ф. Лукичѳв, А.А. Орликовский, А. Буренков, Р. Охснер «Туннельные полевые транзисторы на основе графена» 2013.
- 4.5 Свинцов Д. А. Кинетические явления в структурах на основе графена и его модификаций 2012. Диссертация канд.физ.мат. наук 98 с.
- 4.6 P.Zhao, M.Choudhury, K.Mohanram ,J.Guo Computational Model of Edge Effects in Graphene Nanoribbon Transistors // Nano Research. –Vol. 1. – 2008.–P.395–402.
- 4.7 Tanvir Muntasir, Shuvomoy Das Gupta, and Md. Shofiqul Islam. Analytical Modelling of Current in Higher Width Graphene Nanoribbon Field Effect Transistor / IEEE EDSSC. – 2012. 3-5 December 2012. Chulalongkorn University, Bangkok Thailand.
- 4.8 Lundstrom, M., Guo, J. Nanoscale Transistors: Device Physics, Modeling and Simulation; Springer: New York, 2006. 218 p.
- 4.9 Gunlycke, D., White C.T. Tight-binding energy dispersions of armchair-edge graphene nanostrips // Phys. Rev. B. –V.77. – 2008. P.115116.
- 4.10 V. Ryzhii, M. Ryzhii, A. Satou, and T.Otsuji. Current-voltage characteristics of a graphene-nanoribbon field-effect transistor // Journal Appl. Phys. – V. 103. – 094510. –2008. –P.1-9.
- 5.1 Нанотехнологии в электронике / под ред. Ю.А.Чаплыгина. – М. : Техносфера, 2006. – 488 с.
- 5.2 Алферов Ж. И. Гетеропереходы в полупроводниковой электронике близкого будущего : Физика сегодня и завтра / под ред. В. М. Тучкевича. – Л. : Наука. – 1973. – С. 61-89.
- 5.3 Елисеев П. Г. Инжекционные лазеры на гетеропереходах // Квантовая электроника. – М. : ФИ им. П.Н. Лебедева РАН, 1972. – № 6. – С. 109-116.
- 5.4 Москалюк В.А. Перспективные субмикронные и наноразмерные структуры для компонентов электронной техники / В.А. Москалюк, В.И. Тимофеев // Техника и приборы СВЧ. – Одесса : Политехперіодика, 2008. – №2. – С. 37-46.
- 5.5 Рындин Е.А. Элементная база наноконпьютеров на основе связанных квантовых областей / Е.А. Рындин, Б.Г. Коноплев // Вестник южного научного центра РАН. – Ростов-на-дону : ЮНЦ РАН, 2005, Т.1, №3. – С. 22-28.
- 5.6 Тимофеєв В.І. Моделювання релаксаційних процесів розігріву електронного газу в субмікронних гетеротранзисторах // Наукові вісті НТУУ "КПІ".– К. – 2006. – №6. – С. 23–29.

- 5.7 *Ковалев А.Н.* Полевые транзисторы на AlGaN/GaN-гетероструктурах (обзор) // 4-ое Всероссийское совещание "Нитриды галлия, индия и алюминия . – Структуры и приборы". 18-19 сент. 2000 – СПб : ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, 2000. – С. 82-83.
- 5.8 *Драгунов В.П.* Основы нанoeлектроники : [уч. пособие] / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. – М. : Логос, 2006. – 496 с.
- 5.9 *Соболев М.М.* Состояния Ваннье-Штарка в сверхрешетке квантовых точек InAs/GaAs / М.М. Соболев, А.П. Васильев, В.Н. Неведомский // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2010. – Т. 44, вып. 6. – С. 790-796.
- 5.10 *Whittaker D.M.* Wannier-Stark localization of X and Γ states in GaAs-AlAs short-period superlattices / D.M. Whittaker, M.S. Skolnick, G.W. Smith, C.R. Whitehouse // Physical Review B. – 1990. – Vol. 42. - №6. – P. 3591-3598.
- 5.11 *Grimmeiss H.G.* Optical studies of short-period Si/Ge superlattices by photocapacitance / H.G. Grimmeiss, V. Nagesh, H. Presting, H. Kibbel, E. Kasper // Physical Review B. – 1992. – Vol. 46. - №3. – P. 1236-1239.
- 5.12 *Helm M.* Infrared spectroscopy and transport of electrons in semiconductor superlattices / M. Helm // Semiconductor Science and Technology – 1996. – Vol. 10. - №6. – P. 557 - 561.
- 5.13 *Леденцов Н.Н.* Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры : обзор / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин и др. // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 1998. – Т. 32, вып. 6. – С. 385-410.
- 5.14 *Пожела Ю.К.* Большое повышение максимальной дрейфовой скорости электронов в канале полевого гетеротранзистора / Ю.К. Пожела, В.Г. Мокеров // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2006. – Т. 40, №3. – С. 362-366.
- 5.15 *Мокеров В.Г.* Гетероструктурный транзистор на квантовых точках с повышенной максимальной дрейфовой скоростью электронов / В.Г. Мокеров, Ю. Пожела, К. Пожела, В. Юцене // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2006. – Т. 40, вып. 40. – С. 367-371.
- 5.16 *Мокеров В.Г.* Новый гетероструктурный транзистор на квантовых точках / В.Г. Мокеров, Ю.В. Фёдоров, Л.Э. Великовский, М.Ю. Щербакова // ДАН : (доклады РАН). – М. : Наука/Интерпериодика, 2000.– Т. 375, №6. – С. 754-747.
- 5.17 *Москалюк В. А.* Физика электронных процессов. Часть II. Динамические процессы : [уч. пособие]. – К. : Аверс, 2006. – 186 с.

- 5.18 *Митчелл Э.* Метод конечных элементов для уравнений с частными производными / Митчелл Э., Уэйт Р. ; пер. с англ. – М.: Мир, 1981. – 216 с.
- 5.19 *Рындин Е.А.* Методы решения задач математической физики : [уч. пособие]. – Т.: ТРТУ, 2003. – 119 с.
- 5.20 *Иванов В.В.* Методы вычислений на ЭВМ : [справ. пособие]. – К. : Наукова Думка. – 1986. – 584 с.
- 6.21 *Ильин В.А.* Итерационные методы решения функциональных уравнений // Соросовский Образовательный Журнал. – М. : ISSEP, 2001. – № 2. – С. 116–120.
- 5.22 *Тимофеев В.И.* Численное моделирование транзистора с квантовыми точками на основе соединения нитрида галлия / В. И. Тимофеев, Е. М. Фалеева // Электроника и связь : Тематический выпуск "Проблемы электроники". – К. : НТУУ "КП", ДУКТ, 2007. – С. 62-66.
- 5.23 *Тимофеев В.И.* Моделирование транзистора со встроенными квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // СВЧ техника и телекоммуникационные технологии : 16-я междунар. крымская конф., 11-14 сент. 2006 г. : материалы конф. – Севастополь : СевНТУ, 2006. – С. 222-226.
- 5.24 *Тимофеев В.И.* Методы численного решения систем релаксационных уравнений для анализа субмикронных гетероструктур / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // Электроника и связь. – К. : НТУУ "КП", ДУКТ, 2008. – №47(6). – С. 5-9.
- 5.25 *Тимофеев В.И.* Релаксационные процессы в субмикронных структурах с квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // СВЧ техника и телекоммуникационные технологии : 18-я Международная крымская конференция, 8-12 сент. 2008 г. : материалы конф. – Севастополь : СевНТУ, 2008. – С. 604-606.
- 5.26 *Тимофеев В.И.* Анализ релаксационных процессов в субмикронном гетеротранзисторе с квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // Электроника и связь : Тематический выпуск "Проблемы электроники". – К. : НТУУ "КП", ДУКТ, 2008. – С. 100-103.
- 5.27 *Шик А.Я.* Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков ; под ред. А. Я. Шика. – СПб. : Наука, 2001. – 160 с. 69 ил.
- 5.28 *Зубков В.И.* Моделирование вольт-фарадных характеристик гетероструктур с квантовыми ямами с помощью самосогласованного решения уравнений Шредингера и Пуассона // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2006. – Т. 40,

вып. 10. – С. 1236-1240.

- 5.29 *Ландау Л.Д., Лившиц Е.М.* Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М. : Наука, 1989. – С. 766.
- 5.30 *Климова А.В.* Поперечный пространственный перенос в полевых транзисторах на гетероструктурах с селективным легированием и границы применимости квазигидродинамических моделей / А.В. Климова, В.М. Лукашин, А.Б. Пашковский // Физика и техника полупроводников. – СПб. : ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2009. – Т. 43, вып. 1. – С. 113-121.
- 5.31 *Елисон М.И.* Электрооптические эффекты в структурах с квантовыми ямами / М.И. Елисон, В.А. Петров // Микроэлектроника. – 1987. – Т. 16, вып. 6. – С. 522-532.
- 5.32 *Смирнов М.Б.* Численное моделирование температурной зависимости спектров фотолюминесценции квантовых точек InAs/GaAs / М.Б. Смирнов, В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков, С.В. Сарангов, Г.Э. Цирлин, Н.Д. Захаров // Физика твердого тела. – 2007. – Т. 49, вып. 6. – С. 1126-1131.
- 5.33 *Галицкий В.М.* Задачи по квантовой механике : [учеб. пособие для ВУЗов] / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган //. – М. : Наука, 1992. – 880 с.
- 5.34 *Timofeyev V.I.* The Relaxation Processes Analysis in the Submicron Heterojunction Transistor with Quantum Dots / V.I. Timofeyev, E.M. Faleeva // ISSE 2009 32nd International Spring Seminar on Electronics Technology, May 13-17 2009 y. – Brno, Czech Republic. – P. 262-263.
- 5.35 *Timofeyev V. I.* Model of Heterotransistor with Quantum Dots / V. I. Timofeyev, E. M. Faleeva // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2010. – Vol. 13. – №2. – P. 186-188.
- 5.36 *Timofeyev V.I.* Non-stationary Drift of Electrons in Submicron High Electron Mobility Transistor with two Heterojunctions / V.I. Timofeyev, M. Amini, E.M. Faleeva // ELECTRONICS AND ELECTRICAL ENGINEERING. – Kaunas : Technologija, 2007. – №. 4(76). – P. 33-36.
- 5.37 *Jie Liu.* DC and RF Characteristics of AlGaIn/GaN/InGaIn/GaN Double-Heterojunction HEMTs / Jie Liu, Yugang Zhou, Jia Zhu, Yong Cai, Kei May Lau, Kevin J. Chen // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2007. – Vol. 56. – №.1. – P. 2-10.
- 5.38 *Тимофеев В.И.* Моделирование двухканального гетеротранзистора с квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // СВЧ техника и телекоммуникационные технологии: 20-я Международная крымская конференция, 13-17 сент. 2010 г.: материалы конф. – Севастополь:

- Вебер, 2010. – С. 846-847.
- 5.39 *Тимофеев В.И.* Моделирование схемных параметров гетеротранзисторов с квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // Сучасні інформаційно-комунікаційні технології : IV Міжнар. наук.-техн. конф. (COMINFO'2008), 15-19 вер. 2008 г. : тези доповідей. – К. : ДУІКТ, 2008. – С. 111– 113.
- 5.40 *Тимофеев В.И.* Анализ схемных параметров субмикронных гетероструктур с квантовыми точками / В.И. Тимофеев, Е.М. Фалеева // Электроника и связь : Тематический выпуск "Проблемы электроники", ч. 2. – К. : НТУУ "КПІ", ДУІКТ, 2009. – №4-6. – С. 32-36.
- 5.41 *Timofeyev V.I.* Small-signal and Noise Parameters of Heterotransistor with Quantum Dots / V.I. Timofeyev, E.M. Faleeva // ISSE 2010 33rd International Spring Seminar on Electronics Technology “Polymer Electronics and Nanotechnologies: towards System Integration”, May 12-16 2010. – Warsaw, Poland. – P. 224-226.
- 5.42 *Фалеева Е.М.* Зависимость шумовых характеристик субмикронных гетеротранзисторов с квантовыми точками от параметров квантовых точек / Е.М Фалеева // Сучасні інформаційно-комунікаційні технології: VI Міжнар. наук.-техн. конф. (COMINFO'2010), 04-08 жов. 2010 р.: збірник тез. – К. : ДУІКТ, 2010. – С. 147– 148.
- 5.43 *Фалеева Е.М.* Зависимость шумовых характеристик субмикронных гетеротранзисторов с квантовыми точками от параметров квантовых точек / Е.М Фалеева // Сучасні інформаційно-комунікаційні технології: VI Міжнар. наук.-техн. конф. (COMINFO'2010), 04-08 жов. 2010 р.: збірник тез. – К. : ДУІКТ, 2010. – С. 147– 148.
- 5.44 *Faleyeva E.M, Timofeyev V.I.* Output characteristics of heterotransistors with QDs simulation features. Proceedings of the XXXI International Scientific conf. “Electronics and Nanotechnology” –2011.–P.96.
- 5.45 *Фалеева Е.М., Тимофеев В.И.* Особенности моделирования выходных характеристик гетеротранзистора с квантовыми точками // «Электроника и связь».–2011.–Вып.1.–С.30-33.
- 5.46 *Nayana Remesh, Nagaboopathy Mohan, Sandeep Kumar, Shreesha Prabhu, Ivor Guiney, Colin J. Humphreys, Srinivasan Raghavan, Rangarajan Muralidharan, and Digbijoy N. Nath* Vertical Current Transport in AlGaIn/GaN HEMTs on Silicon: Experimental Investigation and Analytical Model // IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES. –Vol. 66. –№1. – 2019. – P.613-618
- 5.47 *Alvaro D. Latorre-Rey, Ky Merrill, John D. Albrecht, Marco Saraniti* Assessment of Self-Heating Effects Under Lateral Scaling of GaN HEMTs

- // IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES. –Vol. 66. –№2. – 2019. – P.906-916
- 5.48 *Timofeyev V.I., E.Faleyeva, E.Semenovskaya* Electrothermal analysis of GaN power submicron field-effect heterotransistors / Radioelectronics and Communications Systems. V.59. – №2. – P.66-73. Allerton Press. 2016. <http://link.springer.com/article/10.3103/S0735272716020035>
 - 6.1 Абрамов, И. И. Моделирование двухостровковых одноэлектронных структур / И.И. Абрамов, С. А. Игнатенко, Е.Г. Новик // Микросистемная техника. – 2007. – №5. – С.30 – 37.
 - 6.2 Лихарев, К.К. О возможности создания аналоговых и цифровых интегральных схем на основе дискретного одноэлектронного тунелирования /К.К. Лихарев //Микроэлектроника. – 1987. – Т.16, вып.7. – С.195-209.
 - 6.3 Драгунов, В.П. Основы нанoeлектроники: Учеб. Пособие. / В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А.Гриджин – К.: Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2000. – 323с.– ISBN 5-7782-0281-4.
 - 6.4 Datta, S. Resistance of a Molecule M. Paulsson, /F. Zahid, and S. Datta //chapter in Handbook of Nanotechnology. – 2007. Vol. 25. – P.1-8
 - 6.5 Поплавко, Ю.М. Мікроелектроніка і нанoeлектроніка. Вступ до спеціальності: навч. посіб. / Ю. М. Поплавко, О. В. Борисов, В. І. Ільченко – К.: НТУУ «КПІ», 2010. – 160 с. – ISBN 978-966-622-350-3
 - 6.6 Погосов, В.В. Элементы физики поверхности, наноструктур и технологий /В.В. Погосов В.В., Курницкий Ю.А. – Запорожжя: вид. ЗНТУ, 2010. – 365 с. ISBN985-09-0036-9.
 - 6.7 Likharev, K. K. Single-Electron Devices and Their Applications / Likharev K.K.// Published in Proc. IEEE. – 1999. – Vol. 87. – P. 606 – 637.
 - 6.8 Lambe, J. Charge-quantization studies using tunnel capacitor / J.Lambe and R.C. Jaklevic// Phys. Rev. Lett. – 1969. – Vol. 27. – P. 1371-1375
 - 6.9 Likharev, K.K. Theory of the Bloch-wave oscillations in small Josephsonjunctions / K.K. Likharev, A.B. Zorin//, J. Low Temp. Phys. – 1985. – Vol. 59. – P. 347-387.
 - 6.10 Averin, D.V. Coulomb blockade of tunneling, and coherent oscillations in small tunnel junctions / D.V. Averin, K.K. Likharev// J. Low Temp. Phys. – 1987. – Vol . 67. – P. 345 – 377.
 - 6.11 Abramov, I.I. A Two-Dimensional Numerical Model of a Single-Electron Transistor / I. I. Abramov and E. G. Novik //Russian microelectronics. – 2000. – Vol.29, №7. – P.177-180.

- 6.12 Simmons, J.G. Single-electron transistor /J.G. Simmons. // J. Appl. Phys. – 1967. – Vol. 34, №7. – P. 1793 – 1807.,18Fukui, H. Single-electron transistor / H.Fukui, M.Fujishima, K. Hoh // Jpn. Appl. Phys. – 1997. – Vol.37. – P 1.
- 6.13 Павлиш, В.А. Метод моделювання одноелектронного транзистора: функція Гріна / В.А. Павлиш // Науковий вісник НЛТУ України. – 2008 вип. 18.6 – С. 250 – 257.
- 6.14 Мартинес-Дуарт, Дж.М. Нанотехнологии для микро-и оптоэлектроники: учеб. пособие./ Дж.М. Мартинес-Дуарт, Р.Дж. Мартин-Палма, Ф. Агулло-Рюеда – К.: Москва: Техносфера, 2007. – 368с. – ISBN 978-5-94836-126-0.
- 6.15 Травень, В.Ф. Органическая химия: Учебник для вузов: В 2 т./ В.Ф. Травень. – М.: ИКЦ Академкнига, 2004.Т.1 – 727с. – ISBN 5-94628-171-7.
- 6.16 Datta, S. Quantum Transport: Atom to Transistor /S.Datta //Cambridge University Press. – 2005. Vol. 404. – P.1-21.
- 6.17 Henderson, J. I. Adsorption of Diisocyanides on Gold / J. I. Henderson, S. Feng, T. Bein & C. P. Kubiak // Langmuir. – 2000. – Vol. 17. – P. 6183-6187
- 6.18 Hong, S. Molecular conductance spectroscopy of conjugated, phenyl-based molecules on Au(111): the effect of end groups on molecular conduction/S. Hong, R. Reifengerger,W. Tian, S. Datta, J. Henderson , C. P. Kubiak // Superlattices and Microstructures.– 2000. – Vol. 28, № 4. – P 4-15
- 6.19 Xia, Y. Reduction in the Size of Features of Patterned SAMs Generated by Microcontact Printing with Mechanical Compression of the Stamp / Y. Xia and G.M. Whitesides // Adv. Mater. – 1995. – Vol. 7. – P. 471-477.
- 6.20 Lias, S. G. Gas-Phase Ion and Neutral Thermochemistry / S. G. Lias, J. E. Bartmess, J. F. Liebman, J. L. Holmes, R. D. Levin, and W. G. Mallard. – Supplement No.1, 1988. – 872 p. – ISBN 0-88318-562-8.
- 6.21 Ghosh, A.W. Insights from I-V asymmetry in molecular conductors / A.W. Ghosh, F. Zahid, P.S. Damle, and S. Datta // 2002 School of Electrical and Computer Engineering, Purdue University. – 2002
- 7.1 Слюсар В. Наноантенны: подходы и перспективы / В. Слюсар // Электроника: Наука, Технология, Бизнес. – 2009. – №2. – С.58-65.
- 7.2 Burke P.J. Quantitative Theory of Nanowire and Nanotube Antenna Performance / P.J.Burke, S.Li, and Z.Yu. // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2006. –Vol. 5,№ 4. – P. 314–334.
- 7.3 Burke P.J. An rf circuit model for carbon nanotubes / P. J. Burke. // IEEE

- Transactions on Nanotechnology. – 2003. – Vol. 2, № 1. – P. 55–59.
- 7.4 Luryi S. Quantum capacitance devices / Serge Luryi // Appl. Phys. Letter. –1989. – № 52. – P. 501–503.
 - 7.5 Dresselhaus M. S. et al. Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications. – Springer-Verlag, 2000.
 - 7.6 Huang Y. Performance Prediction of Carbon Nanotube Bundle Dipole Antennas / Y. Huang, W-Y. Yin, Q.H. Liu // IEEE Transactions On Nanotechnology.–2009.–Vol.7, №3. – P.331–337.
 - 7.7 Sarto M.S. New Electron-Waveguide-Based Modeling for Carbon Nanotube Interconnects / M.S. Sarto, A. Tamburrano, M. D’Amore // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol.8, №2. – P.214–225.
 - 7.8 Liu Z. Fabrication and Electrical Characterization of Densified Carbon Nanotube Micropillars for IC Interconnection / Z. Liu, L. Ci, S. Kar, P.M. Ajayan, J.-Q. Lu // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol.8, №2. – P.196–203.
 - 7.9 Ngo Q. Structural and Electrical Characterization of Carbon Nanofibers for Interconnect Via Applications / Ngo Q., Yamada T., Suzuki M., Ominami Y., Cassell A.M., Li J., Meyyappan M., Yang C.Y. // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol.6, №6. – P.688–695.
 - 7.10 Wang L. Microwave (8–50 GHz) Characterization of Multiwalled Carbon Nanotube Papers Using Rectangular Waveguides / L. Wang, R. Zhou, H. Xin // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. – 2009. – Vol.56, №2. – P.499–506.
 - 7.11 Akinwande D. Carbon Nanotube Quantum Capacitance for Nonlinear Terahertz Circuits / D. Akinwande., Y. Nishi, H.-S.P. Wong // IEEE Transactions On Nanotechnology. – 2009. – Vol.8, №1. – P.31–36.